Л. Д. Фаддеев
О. А. Якубовский



ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

для студентов-математиков

ЛЕНИНГРАДСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА
И ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ А. А. ЖДАНОВА

Л. Д. ФАДДЕЕВ, О. А. ЯКУБОВСКИЙ

ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ ДЛЯ СТУДЕНТОВ-МАТЕМАТИКОВ



Издательство Ленинградского университета
Ленинград 1980

Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
Ленинградского университета

УДК 530.145

Фаддеев Л. Д., Якубовский О. А. **Лекции по квантовой механике для студентов-математиков.** Учеб. пособие. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980. 200 с. Ил. — 15.

В основу книги положены лекции, которые в течение ряда лет читаются студентам математических специальностей математико-механического факультета Ленинградского университета. От имеющихся учебников квантовой механики книга отличается тем, что она ориентирована в основном на математическую аудиторию. В связи с этим большее внимание уделяется общим вопросам квантовой механики и ее математическому аппарату. По-иному, чем это принято в физической литературе, излагаются основы квантовой механики, подробно описана взаимосвязь квантовой и классической механик, включены параграфы, посвященные применению теории представлений групп и математическим вопросам квантовой теории рассеяния.

Кроме студентов-математиков книга может быть полезной также студентам, специализирующимся по теоретической физике, которым она позволит взглянуть на квантовую механику с новой для них точки зрения.

Ф $\frac{20203,20402-024}{076(02)-80}$ 80—80.1704020000

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящее пособие является подробным конспектом лекций, которые читаются на математико-механическом факультете Ленинградского государственного университета для студентов математических специальностей. Программа курса квантовой механики была разработана первым из авторов, который и читал этот курс в 1968—1973 гг. В последующие годы курс квантовой механики читался вторым автором. Разумеется, за эти годы курс несколько изменился, однако цель его осталась прежней — дать изложение квантовой механики с точки зрения более близкой студенту-математику, чем это принято в физической литературе. Мы учитываем, что студенты не изучают общей физики. Естественно, что в курсе, предназначенном математикам, мы стремились к более аккуратному, чем это принято, изложению математических вопросов квантовой механики, но мы не стремились к полной математической строгости, так как строгое изложение ряда вопросов потребовало бы существенного увеличения объема курса.

В литературе на русском языке существует только одна книга, преследующая те же задачи. Это книга известного американского математика Дж. Макки «Лекции по математическим основам квантовой механики». От книги Макки настоящие лекции существенно отличаются как по способу изложения основ квантовой механики, так и по подбору материала. Кроме того, настоящие лекции предъявляют несколько меньшие требования к математической подготовке студентов. Тем не менее мы многое заимствовали как из книги Макки, так и из классической книги фон Неймана «Математические основы квантовой механики».

В основе подхода к построению квантовой механики, принятого в лекциях, лежит утверждение, что квантовая и классическая механики являются различными реализациями одной

и той же абстрактной математической структуры. Особенности этой структуры выясняются в первых параграфах, посвященных классической механике. Эти параграфы являются неотъемлемой частью курса и пропускать их при чтении нельзя, тем более, что материал этих параграфов практически не пересекается с материалом курса теоретической механики. Логическим завершением такого подхода к построению квантовой механики является параграф, посвященный взаимосвязи квантовой и классической механик и предельному переходу от квантовой механики к классической.

При отборе материала параграфов, посвященных приложениям квантовой механики, мы старались выделить те вопросы, которые связаны с постановкой интересных математических задач. В связи с этим большое внимание уделяется задачам, связанным с теорией представлений групп, и математическим вопросам теории рассеяния. В остальном подбор материала соответствует традиционным учебникам, посвященным общим вопросам квантовой механики, например, книгам В. А. Фока или П. Дирака.

Авторы благодарны В. М. Бабичу, который прочел рукопись и сделал ряд ценных замечаний.

§ 1. Алгебра наблюдаемых классической механики

Рассмотрим простейшую задачу классической механики — задачу о движении материальной точки (частицы) с массой m в силовом поле $V(\mathbf{x})$, где $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$ — радиус-вектор частицы. Сила, действующая на частицу,

$$\mathbf{F} = -\operatorname{grad} V = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}}.$$

Основными физическими характеристиками частицы являются ее координаты x_1, x_2, x_3 и проекции вектора скорости $\mathbf{v}(v_1, v_2, v_3)$. Все остальные характеристики есть функции от $\mathbf{x}$ и $\mathbf{v}$, например, импульс $p = m\mathbf{v}$, момент импульса $\mathbf{l} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} = m\mathbf{x} \times \mathbf{v}$, энергия частицы $E = m\mathbf{v}^2/2 + V(\mathbf{x})$.

Уравнения движения материальной точки в форме Ньютона имеют вид

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}}, \qquad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}. \tag{1}$$

В дальнейшем удобно вместо скорости $\mathbf{v}$ в качестве основной переменной использовать импульс $\mathbf{p}$. В новых переменных уравнения движения записываются таким образом:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}}, \qquad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}. \tag{2}$$

Замечая, что $\frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}$, $\frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}$, где $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ — функция Гамильтона для частицы в потенциальном поле, мы приходим к уравнениям в форме Гамильтона

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \qquad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}. \tag{3}$$

Из курса теоретической механики известно, что широкий класс механических систем и, в частности, консервативные

системы описываются уравнениями Гамильтона

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{4}$$

Здесь q_i и p_i — обобщенные координаты и импульсы, $H = H(q_1, \ldots, q_n; p_1, \ldots, p_n)$ — функция Гамильтона, число n называется числом степеней свободы системы. Напомним, что для консервативной системы функция Гамильтона H совпадает с выражением для полной энергии системы в переменных q_i и p_i. Выпишем функцию Гамильтона для системы N материальных точек, попарно взаимодействующих между собой

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i<j}^{N} V_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^{N} V_i(\mathbf{x}_i). \tag{5}$$

Здесь в качестве обобщенных координат q взяты декартовы координаты частиц, число степеней свободы такой системы $n = 3N$, $V_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ есть потенциал взаимодействия i-й и j-й частиц. Зависимость V_{ij} только от разности $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ обеспечивает выполнение третьего закона Ньютона. (Действительно, сила, действующая на i-ю частицу со стороны j-й частицы, $\mathbf{F}_{ij} = -\frac{\partial V_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i} = \frac{\partial V_{ij}}{\partial \mathbf{x}_j} = -\mathbf{F}_{ji}$.) Потенциалы $V_i(\mathbf{x}_i)$ описывают взаимодействие i-й частицы с внешним полем. Первое слагаемое в формуле (5) — кинетическая энергия системы частиц.

Для произвольной механической системы все физические характеристики есть функции от обобщенных координат и импульсов. Мы введем в рассмотрение множество $\mathfrak{A}$ всех вещественных, бесконечно дифференцируемых функций* $f(q_1, \ldots, q_n; p_1, \ldots, p_n)$, которые будем называть наблюдаемыми. Множество наблюдаемых $\mathfrak{A}$, очевидно, является линейным пространством и образует вещественную алгебру с обычными для функций операциями сложения и умножения. Вещественное $2n$-мерное пространство с элементами $(q_1, \ldots, q_n; p_1, \ldots, p_n)$ называется фазовым пространством и обозначается через $\mathcal{M}$. Таким образом, алгебра наблюдаемых классической механики есть алгебра вещественных гладких функций, задаваемых на фазовом пространстве $\mathcal{M}$.

Мы введем ниже в алгебре наблюдаемых еще одну операцию, которая связана с эволюцией механической системы. Для простоты все дальнейшее изложение ведется на примере системы с одной степенью свободы. Уравнения Гамильтона в этом случае имеют вид

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \qquad H = H(q, p). \tag{6}$$

---

* Мы не обсуждаем вопрос о введении топологии в алгебре наблюдаемых. К счастью, большинство физических вопросов от этой топологии не зависит.

Задача Коши для системы (6) и начальных условий

$$q\,|_{t=0} = q_0, \qquad p\,|_{t=0} = p_0 \tag{7}$$

имеет единственное решение

$$q = q(q_0,\ p_0,\ t), \qquad p = p(q_0,\ p_0,\ t). \tag{8}$$

Для сокращения записи точку фазового пространства (q, p) иногда будем обозначать через μ, а уравнения Гамильтона записывать в виде

$$\dot{\mu} = v(\mu), \tag{9}$$

где $v(\mu)$ — векторное поле этих уравнений, сопоставляющее каждой точке μ фазового пространства вектор v с компонентами $\frac{\partial H}{\partial p}$, $-\frac{\partial H}{\partial q}$.

Уравнения Гамильтона порождают однопараметрическую коммутативную группу преобразований фазового пространства в себя *

$$G_t\colon\ \mathcal{M} \to \mathcal{M},$$

где $G_t\mu$ есть решение уравнений Гамильтона с начальным условием $G_t\mu\,|_{t=0} = \mu$. Справедливы равенства:

$$G_{t+s} = G_t G_s = G_s G_t, \qquad G_t^{-1} = G_{-t}. \tag{10}$$

В свою очередь преобразования G_t порождают семейство преобразований алгебры наблюдаемых в себя

$$U_t\colon\ \mathfrak{A} \to \mathfrak{A},$$

где

$$U_t f(\mu) = f_t(\mu) = f(G_t\mu). \tag{11}$$

В координатной записи функция $f_t(q, p)$ определяется следующим образом:

$$f_t(q_0,\ p_0) = f(q(q_0,\ p_0,\ t),\ p(q_0,\ p_0,\ t)). \tag{12}$$

Найдем дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет функция $f_t(q, p)$. Для этого продифференцируем тождество $f_{s+t}(\mu) = f_t(G_s\mu)$ по переменной s и положим $s = 0$,

$$\left.\frac{\partial f_{s+t}(\mu)}{\partial s}\right|_{s=0} = \frac{\partial f_t(\mu)}{\partial t},$$

$$\left.\frac{\partial f_t(G_s\mu)}{\partial s}\right|_{s=0} = \nabla f_t(\mu)\cdot v(\mu) = \frac{\partial f_t}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f_t}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}.$$

---

* Мы предполагаем, что уравнения Гамильтона с начальными условиями (7) имеют единственное решение на всей вещественной оси. Легко построить примеры, в которых глобальное решение и соответственно группа преобразований G_t не существуют. Эти случаи не представляют интереса, и мы их не рассматриваем.

Таким образом, функция $f_t(q, p)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{\partial f_t}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial f_t}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial f_t}{\partial p} \tag{13}$$

и начальному условию

$$f_t(q, p)|_{t=0} = f(q, p). \tag{14}$$

Уравнение (13) с начальным условием (14) имеет единственное решение, которое может быть получено по формуле (12), т. е. для построения решений уравнения (13) достаточно знать решения уравнений Гамильтона.

Уравнение (13) может быть переписано в виде

$$\frac{df_t}{dt} = \{H, f_t\}, \tag{15}$$

где $\{H, f_t\}$ — скобка Пуассона функций H и f_t. Для произвольных наблюдаемых f и g скобка Пуассона определяется формулой

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p},$$

а в случае системы с n степенями свободы

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}\right).$$

Перечислим основные свойства скобок Пуассона:

1) $\{f, g+\lambda h\} = \{f, g\} + \lambda\{f, h\}$ (линейность);
2) $\{f, g\} = -\{g, f\}$ (кососимметричность);
3) $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0$ (тождество Якоби);
4) $\{f, gh\} = g\{f, h\} + \{f, g\}h$.

Свойства 1), 2) и 4) прямо следуют из определения скобок Пуассона. Свойство 4) показывает, что операция «скобка Пуассона» есть дифференцирование алгебры наблюдаемых. Действительно, скобка Пуассона может быть переписана в форме

$$\{f, g\} = X_f g,$$

где $X_f = \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p}$ — линейный дифференциальный оператор первого порядка, и свойство 4) принимает вид

$$X_f gh = (X_f g) h + g X_f h.$$

Свойство 3) может быть проверено дифференцированием, однако его можно доказать следующим рассуждением. Каждое слагаемое двойной скобки Пуассона содержит множителем вторую производную от одной из функций по одной из переменных, т. е. левая часть 3) есть линейная однородная функция от вто-

рых производных. С другой стороны, вторые производные от h могут входить только в сумму $\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} = (X_f X_g - X_g X_f) h$, а коммутатор линейных дифференциальных операторов первого порядка является дифференциальным оператором первого порядка, поэтому вторые производные от h в левую часть 3) не войдут. В силу симметрии левая часть 3) вообще не содержит вторых производных, т. е. равна нулю.

Скобка Пуассона $\{f, g\}$ вводит в алгебру наблюдаемых структуру вещественной алгебры Ли*. Итак, множество наблюдаемых обладает следующей алгебраической структурой. Множество $\mathfrak{A}$ является:

1) вещественным линейным пространством;
2) коммутативной алгеброй с операцией fg;
3) алгеброй Ли с операцией $\{f, g\}$.

Две последние операции связаны соотношением

$$\{f, gh\} = \{f, g\} h + g \{f, h\}.$$

В алгебре наблюдаемых $\mathfrak{A}$ есть выделенный элемент — функция Гамильтона H, роль которой — описание изменения наблюдаемых со временем

$$\frac{df_t}{dt} = \{H, f_t\}.$$

Покажем, что отображение U_t: $\mathfrak{A} \to \mathfrak{A}$ сохраняет все операции в $\mathfrak{A}$:

$$h = f + g \to h_t = f_t + g_t,$$
$$h = fg \to h_t = f_t g_t,$$
$$h = \{f, g\} \to h_t = \{f_t, g_t\},$$

т. е. является автоморфизмом алгебры наблюдаемых. Проверим для примера последнее утверждение. Для этого достаточно убедиться в том, что уравнение и начальное условие для h_t есть следствие уравнений и начальных условий для функций f_t и g_t

$$\frac{\partial h_t}{\partial t} = \left\{\frac{\partial f_t}{\partial t}, g_t\right\} + \left\{f_t, \frac{\partial g_t}{\partial t}\right\} =$$
$$= \{\{H, f_t\}, g_t\} + \{f_t \{H, g_t\}\} = \{H, \{f_t, g_t\}\} = \{H, h_t\}.$$

Здесь были использованы свойства 2) и 4) скобок Пуассона. Далее,

$$h_t|_{t=0} = \{f_t, g_t\}|_{t=0} = \{f, g\}.$$

Теперь наше утверждение следует из единственности решения уравнения (13) с начальным условием (14).

---

* Напомним, что линейное пространство с бинарной операцией, удовлетворяющей условиям 1)—3), называется алгеброй Ли.

§ 2. Состояния

Понятие состояния системы можно связать непосредственно с условиями эксперимента. Всякий физический эксперимент сводится к измерению численного значения наблюдаемой для системы, поставленной в определенные условия, которые можно назвать условиями эксперимента. Считается, что эти условия могут воспроизводиться многократно, однако мы не предполагаем заранее, что при повторном проведении эксперимента измерение даст то же самое значение наблюдаемой. На вопрос, с чем связана неопределенность в результатах эксперимента, возможны два ответа.

1) Число условий, которые фиксируются при проведении экспериментов недостаточно для того, чтобы однозначно определить результаты измерения наблюдаемых. Если неоднозначность возникает только по этой причине, то по крайней мере в принципе эти условия можно дополнить новыми, т. е. поставить эксперимент более «чисто» и тогда результаты всех измерений будут определены однозначно.

2) Свойства системы таковы, что при повторных экспериментах наблюдаемые могут принимать различные значения, независимо от числа и выбора условий эксперимента.

Разумеется, если имеет место 2), то недостаточность условий может лишь усугублять неоднозначность результатов экспериментов. Подробно 1) и 2) мы обсудим после того, как научимся описывать состояния в классической и квантовой механике.

Мы будем считать, что условия эксперимента определяют состояние системы, если при многократном повторении опыта при этих условиях возникают вероятностные распределения для всех наблюдаемых. В этом случае мы будем говорить об измерении наблюдаемой f для системы, находящейся в состоянии ω.

Более точно: состояние ω на алгебре наблюдаемых $\mathfrak{A}$ сопоставляет каждой наблюдаемой f вероятностное распределение ее возможных значений, т. е. меру на вещественной оси $\mathbf{R}$.

Пусть f — наблюдаемая, E — борелевское множество на вещественной оси $\mathbf{R}$. Тогда определение состояния ω может быть записано

$$f,\ E \xrightarrow{\omega} \omega_f(E).$$

Напомним свойства вероятностей меры

$$0 \leqslant \omega_f(E) \leqslant 1, \quad \omega_f(\varnothing) = 0, \quad \omega_f(\mathbf{R}) = 1, \tag{1}$$

если $E_1 \cap E_2 = \varnothing$, то $\omega_f(E_1 \cup E_2) = \omega_f(E_1) + \omega_f(E_2)$.

Среди наблюдаемых могут встретиться функционально зависимые, поэтому необходимо наложить условие на вероятностные распределения таких наблюдаемых. Если наблюдаемая φ есть функция от наблюдаемой f, $\varphi = \varphi(f)$, то это утверждение

E – м-во значений наблюдаемой
$\omega_f(E)$ – вероятность того что наблюдаемая f примет значение из м-ва E; ω_f – вероятностная мера, сопоставленная наблюдаемой f состоянием ω.

подразумевает, что измерение численного значения наблюдаемой f, которое приводит к значению f_0, одновременно является измерением наблюдаемой φ и дает для нее численное значение $\varphi_0 = \varphi(f_0)$. Поэтому $\omega_f(E)$ и $\omega_{\varphi(f)}(E)$ связаны соотношением

$$\omega_{\varphi(f)}(E) = \omega_f(\varphi^{-1}(E)), \tag{2}$$

где $\varphi^{-1}(E)$ — прообраз множества E при отображении φ.

Выпуклая комбинация вероятностных мер

$$\omega_f(E) = \alpha\omega_{1f}(E) + (1-\alpha)\,\omega_{2f}(E), \qquad 0 < \alpha < 1 \tag{3}$$

удовлетворяет свойствам (1) для любой наблюдаемой f и соответствует состоянию, которое мы будем обозначать

$$\omega = \alpha\omega_1 + (1-\alpha)\,\omega_2. \tag{4}$$

Таким образом, состояния образуют выпуклое множество. Иногда выпуклую комбинацию (4) состояний ω_1 и ω_2 называют смесью этих состояний. Если для некоторого состояния ω из (4) следует, что $\omega_1 = \omega_2 = \omega$, будем говорить, что состояние ω не раскладывается в выпуклую комбинацию других состояний. Такие состояния называются чистыми, все остальные — смешанными.

В качестве множества E удобно выбирать интервал вещественной оси $(-\infty, \lambda]$. По определению $\omega_f(\lambda) = \omega_f((-\infty, \lambda])$ и является функцией распределения наблюдаемой f в состоянии ω. Численно $\omega_f(\lambda)$ равна вероятности получить значение, не превосходящее λ при измерении наблюдаемой f в состоянии ω. Из (1) следует, что функция распределения $\omega_f(\lambda)$ — неубывающая функция λ, $\omega_f(-\infty) = 0$, $\omega_f(+\infty) = 1$.

Математическое ожидание (среднее значение) наблюдаемой f в состоянии ω определяется формулой *

$$\langle f\,|\,\omega\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, d\omega_f(\lambda).$$

Заметим, что знание математических ожиданий для всех наблюдаемых эквивалентно знанию вероятностных распределений. Чтобы убедиться в этом, достаточно рассмотреть функцию от наблюдаемой $\theta(\lambda - f)$, где $\theta(x)$ — функция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geqslant 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Нетрудно понять, что

$$\omega_f(\lambda) = \langle \theta(\lambda - f)\,|\,\omega\rangle. \tag{5}$$

---

* Обозначение $\langle f|\omega\rangle$ для среднего значения наблюдаемой не следует путать с часто используемым в квантовой механике обозначением Дирака для скалярного произведения векторов $\langle\varphi|\psi\rangle$.

Потребуем выполнения следующих, естественных с физической точки зрения условий для средних значений наблюдаемых:

1) $\langle C|\omega\rangle = C$,

2) $\langle f+\lambda g|\omega\rangle = \langle f|\omega\rangle + \lambda\langle g|\omega\rangle$, (6)

3) $\langle f^2|\omega|\rangle \geqslant 0$.

Если такие требования введены, то реализация алгебры наблюдаемых уже сама определяет способ описания состояний. Действительно, среднее значение есть линейный положительный функционал, определенный на алгебре наблюдаемых $\mathfrak{A}$. Общая форма такого функционала:

$$\langle f|\omega\rangle = \int\limits_{\mathcal{M}} f(p, q)\, d\mu_\omega(p, q), \tag{7}$$

где $d\mu_\omega(p, q)$ — дифференциал меры на фазовом пространстве, а интеграл берется по всему фазовому пространству. Из условия 1) следует, что

$$\int\limits_{\mathcal{M}} d\mu_\omega(p, q) = \mu_\omega(\mathcal{M}) = 1. \tag{8}$$

Мы видим, что состояние в классической механике описывается заданием вероятностного распределения на фазовом пространстве. Формулу (7) можно переписать в виде

$$\langle f|\omega\rangle = \int\limits_{\mathcal{M}} f(p, q)\, \rho_\omega(p, q)\, dp\, dq, \tag{9}$$

т. е. мы приходим к обычному в статистической физике описанию состояния системы при помощи функции распределения $\rho_\omega(p, q)$, которая в общем случае является обобщенной положительной функцией. Условие нормировки функции распределения имеет вид

$$\int\limits_{\mathcal{M}} \rho(p, q)\, dp\, dq = 1. \tag{10}$$

В частности, легко видеть, что чистому состоянию соответствует функция распределения

$$\rho(q, p) = \delta(q - q_0)\, \delta(p - p_0), \tag{11}$$

где $\delta(x)$ — δ-функция Дирака. Соответствующая мера на фазовом пространстве сосредоточена в точке q_0, p_0, и чистое состояние определяется заданием этой точки фазового пространства. По этой причине фазовое пространство $\mathcal{M}$ иногда называют пространством состояний. Среднее значение наблюдаемой f в чистом состоянии ω

$$\langle f|\omega\rangle = f(q_0, p_0). \tag{12}$$

Эта формула непосредственно следует из определения δ-функции

$$f(q_0, p_0) = \int_{\mathcal{M}} f(q, p)\,\delta(q - q_0)\,\delta(p - p_0)\,dq\,dp. \qquad (13)$$

Обычно в курсах механики ограничиваются изучением чистых состояний, а смешанные состояния с функцией распределения отличной от (11) рассматриваются в статистической физике. Введение с самого начала в теорию смешанных состояний оправдывается следующими обстоятельствами. Формулировка классической механики на языке состояний и наблюдаемых наиболее близка к формулировке квантовой механики и позволяет единообразно описывать состояния механики и статистической физики. Такая формулировка позволит нам в дальнейшем детально проследить за предельным переходом от квантовой механики к классической. Мы увидим, что в квантовой механике тоже существуют чистые и смешанные состояния, причем при предельном переходе чистое квантовое состояние может превращаться в смешанное классическое, поэтому предельный переход проще всего описывается при единообразном рассмотрении чистых и смешанных состояний.

Выясним теперь физический смысл смешанных и чистых состояний классической механики и найдем причину, по которой результаты опытов необязательно определяются однозначно условиями эксперимента.

Рассмотрим смесь состояний ω_1 и ω_2

$$\omega = \alpha\omega_1 + (1 - \alpha)\,\omega_2, \qquad 0 < \alpha < 1.$$

Для средних значений, очевидно, справедлива формула

$$\langle f \mid \omega\rangle = \alpha\,\langle f \mid \omega_1\rangle + (1 - \alpha)\,\langle f \mid \omega_2\rangle. \qquad (14)$$

Формулы (14) и (3) допускают следующее толкование. Утверждение о том, что система находится в состоянии ω, эквивалентно утверждению, что система с вероятностью α находится в состоянии ω_1 и с вероятностью $(1-\alpha)$ в состоянии ω_2. Заметим, что такое толкование возможно, но не является необходимым.

Простейшее смешанное состояние является выпуклой комбинацией двух чистых

$$\rho(q, p) = \alpha\delta(q - q_1)\,\delta(p - p_1) + (1 - \alpha)\,\delta(q - q_2)\,\delta(p - p_2).$$

Возможны смеси n чистых состояний

$$\rho(q, p) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \delta(q - q_i)\,\delta(p - p_i), \quad \alpha_i > 0, \quad \sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 1.$$

Зресь α_i может быть истолковано как вероятность реализации чистого состояния, задаваемого точкой фазового пространства q_i, p_i. Наконец, в общем случае для функции распределения

можно написать

$$\rho(q, p) = \int_{\mathcal{M}} \rho(q_0, p_0)\, \delta(q - q_0)\, \delta(p - p_0)\, dq_0\, dp_0.$$

Такая запись приводит к обычному в статистической физике толкованию функции распределения: $\int_{\Omega} \rho(q, p)\, dq\, dp$ есть вероятность обнаружить систему в чистом состоянии, изображаемом точкой из области Ω фазового пространства. Еще раз подчеркнем, что в таком толковании нет необходимости, так как чистые и смешанные состояния могут быть описаны в рамках единого формализма.

Одной из важнейших характеристик вероятностного распределения является дисперсия

$$\Delta_\omega^2 f = \langle (f - \langle f \mid \omega \rangle)^2 \mid \omega \rangle = \langle f^2 \mid \omega \rangle - \langle f \mid \omega \rangle^2. \tag{15}$$

Покажем, что смешивание состояний приводит к увеличению дисперсии. Более точная формулировка этого утверждения содержится в неравенствах

$$\Delta_\omega^2 f \geqslant \alpha \Delta_{\omega_1}^2 f + (1 - \alpha)\, \Delta_{\omega_2}^2 f, \tag{16}$$

$$\Delta_\omega f\, \Delta_\omega g \geqslant \alpha \Delta_{\omega_1} f \Delta_{\omega_1} g + (1 - \alpha)\, \Delta_{\omega_2} f \Delta_{\omega_2} g, \tag{17}$$

причем знаки равенства имеют место только при условии, что средние значения наблюдаемых в состояниях ω_1 и ω_2 совпадают

$$\langle f \mid \omega_1 \rangle = \langle f \mid \omega_2 \rangle, \quad \langle g \mid \omega_1 \rangle = \langle g \mid \omega_2 \rangle.$$

В ослабленной форме (16) и (17) можно записать в виде

$$\Delta_\omega^2 f \geqslant \min(\Delta_{\omega_1}^2 f,\ \Delta_{\omega_2}^2 f), \tag{18}$$

$$\Delta_\omega f \Delta_\omega g \geqslant \min(\Delta_{\omega_1} f \Delta_{\omega_1} g,\ \Delta_{\omega_2} f \Delta_{\omega_2} g). \tag{19}$$

При доказательстве используется элементарное неравенство

$$\varphi(x) = \alpha + (1 - \alpha)\, x^2 - (\alpha + (1 - \alpha)\, x)^2 \geqslant 0, \qquad -\infty < x < \infty, \tag{20}$$

причем

$$\varphi(1) = 0, \quad \varphi(x) > 0 \quad \text{при} \quad x \neq 1. \tag{21}$$

Используя (14) и (20), имеем

$$\begin{aligned} \Delta_\omega^2 f &= \langle f^2 \mid \omega \rangle - \langle f \mid \omega \rangle^2 = \\ &= \alpha \langle f^2 \mid \omega_1 \rangle + (1 - \alpha) \langle f^2 \mid \omega_2 \rangle - [\alpha \langle f \mid \omega_1 \rangle + (1 - \alpha) \langle f \mid \omega_2 \rangle]^2 \geqslant \\ &\geqslant \alpha \langle f^2 \mid \omega_1 \rangle + (1 - \alpha) \langle f^2 \mid \omega_2 \rangle - \alpha \langle f \mid \omega_1 \rangle^2 - (1 - \alpha) \langle f \mid \omega_2 \rangle^2 = \\ &= \alpha \Delta_{\omega_1}^2 f + (1 - \alpha)\, \Delta_{\omega_2}^2 f. \end{aligned}$$

Неравенство (16) доказано. Неравенство (17) является следствием (16). Действительно,

$$\Delta^2_\omega f \Delta^2_\omega g \geqslant \left(\alpha\Delta^2_{\omega_1} f + (1-\alpha)\,\Delta^2_{\omega_2} f\right)\left(\alpha\Delta^2_{\omega_1} g + (1-\alpha)\,\Delta^2_{\omega_2} g\right) \geqslant$$
$$\geqslant [\alpha\Delta_{\omega_1} f \Delta_{\omega_1} g + (1-\alpha)\,\Delta_{\omega_2} f \Delta_{\omega_2} g]^2.$$

Для чистых состояний

$$\rho(q,\ p) = \delta(q-q_0)\,\delta(p-p_0),$$
$$\langle f\,|\,\omega\rangle = f(q_0,\ p_0),$$
$$\Delta^2_\omega f = f^2(q_0,\ p_0) - f^2(q_0,\ p_0) = 0,$$

т. е. для чистых состояний классической механики дисперсия равна нулю. Это значит, что для системы в чистом состоянии результат измерения любой наблюдаемой определен однозначно. Состояние классической системы будет чистым, если условия эксперимента фиксируют к моменту измерения значения всех обобщенных координат и импульсов. Ясно, что если макроскопическое тело рассматривать как механическую систему из N молекул, где N имеет обычно порядок 10^{23}, то никакие условия реального физического эксперимента не фиксируют значений q_0 и p_0 для всех молекул и описание такой системы при помощи чистых состояний является бесполезным. Поэтому в статистической физике изучаются смешанные состояния.

Подведем некоторые итоги. В классической механике существует бесконечное множество состояний системы (чистые состояния), в которых все наблюдаемые имеют вполне определенные значения. В реальных экспериментах с системами из огромного числа частиц возникают смешанные состояния. Разумеется, такие состояния возможны и в экспериментах с простыми механическими системами. В этом случае теория дает только вероятностные предсказания.

§ 3. Теорема Лиувилля и две картины движения в классической механике

Этот раздел мы начнем с доказательства важной теоремы Лиувилля. Пусть Ω — некоторая область фазового пространства $\mathscr{M}$. Обозначим через $\Omega(t)$ образ этой области под действием фазового потока, т. е. множество точек $G_t\mu$, $\mu \in \Omega$. Пусть $V(t)$ — объем области $\Omega(t)$. Теорема Лиувилля утверждает, что

$$\frac{dV(t)}{dt} = 0.$$

Доказательство:

$$V(t) = \int\limits_{\Omega(t)} d\mu = \int\limits_{\Omega} \left|\frac{D(G_1\mu)}{D(\mu)}\right| d\mu, \qquad d\mu = dq\,dp.$$

Здесь через $D(G_t\mu)/D(\mu)$ обозначен определитель Якоби преобразования G_t. Для доказательства теоремы достаточно показать, что

$$\frac{D(G_t\mu)}{D(\mu)}=1 \tag{1}$$

при всех t. При $t=0$ равенство (1) очевидно. Покажем теперь, что

$$\frac{d}{dt}\frac{D(G_t\mu)}{D(\mu)}=0. \tag{2}$$

При $t=0$ формула (2) проверяется непосредственно

$$\frac{d}{dt}\frac{D(G_t\mu)}{D(\mu)}\bigg|_{t=0}=\left[\frac{D(\dot{q},\ p)}{D(q,\ p)}+\frac{D(q,\ \dot{p})}{D(q,\ p)}\right]\bigg|_{t=0}=$$
$$=\left(\frac{\partial\dot{q}}{\partial q}+\frac{\partial\dot{p}}{\partial p}\right)\bigg|_{t=0}=\frac{\partial^2 H}{\partial q\,\partial p}-\frac{\partial^2 H}{\partial p\,\partial q}=0.$$

При $t\neq 0$, дифференцируя тождество

$$\frac{D(G_{t+s}\mu)}{D(\mu)}=\frac{D(G_{t+s}\mu)}{D(G_t\mu)}\frac{D(G_t\mu)}{D(\mu)}$$

по s и полагая $s=0$, получим

$$\frac{d}{dt}\frac{D(G_t\mu)}{D(\mu)}=\left[\frac{d}{ds}\frac{D(G_sG_t\mu)}{D(G_t\mu)}\right]\bigg|_{s=0}\frac{D(G_t\mu)}{D(\mu)}=0.$$

Таким образом, равенство (2) справедливо при всех t. Теорема доказана. ■

Рассмотрим теперь эволюцию механической системы. Нас интересует зависимость от времени средних значений наблюдаемых $\langle f|\omega\rangle$. Возможны два способа описания этой зависимости или две картины движения. Мы начнем с формулировки так называемой картины Гамильтона. В этой картине зависимость от времени наблюдаемых определяется уравнением (1.15)*, а состояния от времени не зависят

$$\frac{df_t}{dt}=\{H,\ f_t\},\qquad \frac{d\rho}{dt}=0.$$

Среднее значение наблюдаемой f в состоянии ω зависит от времени по формуле

$$\langle f_t|\omega\rangle=\int\limits_{\mathcal{M}} f_t(\mu)\,\rho(\mu)\,d\mu=\int\limits_{\mathcal{M}} f(G_t\mu)\,\rho(\mu)\,d\mu \tag{3}$$

или подробнее

$$\langle f_t|\omega\rangle=\int\limits_{\mathcal{M}} f(q(q_0,\ p_0,\ t),\ p(q_0,\ p_0,\ t))\,\rho(q_0,\ p_0)\,dq_0\,dp_0. \tag{4}$$

---

* При ссылке на формулу из предыдущих параграфов номер соответствующего параграфа вводится перед номером формулы.

Напомним, что $q(q_0, p_0, t)$ и $p(q_0, p_0, t)$ — решения уравнений Гамильтона с начальными условиями $q|_{t=0} = q_0$, $p|_{t=0} = p_0$.

Для чистого состояния $\rho(q, p) = \delta(q - q_0)\delta(p - p_0)$, и из формулы (4) следует, что

$$\langle f_t | \omega \rangle = f(q(q_0, p_0, t), p(q_0, p_0, t)).$$

Это обычная формула классической механики для зависимости от времени наблюдаемой в чистом состоянии *. Из формулы (4) ясно, что состояние в картине Гамильтона определяет вероятностное распределение начальных значений q и p.

Альтернативный способ описания движения получится, если в (3) сделать замену переменных $G_t\mu \to \mu$. Тогда

$$\int_{\mathcal{M}} f(G_t\mu)\,\rho(\mu)\,d\mu = \int_{\mathcal{M}} f(\mu)\,\rho(G_{-t}\mu)\left|\frac{D(G_{-t}\mu)}{D(\mu)}\right| d\mu =$$
$$= \int_{\mathcal{M}} f(\mu)\,\rho_t(\mu)\,d\mu = \langle f | \omega_t \rangle.$$

Здесь использовано равенство (1) и введено обозначение $\rho_t(\mu) = \rho(G_{-t}\mu)$. Нетрудно понять, что $\rho_t(\mu)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\rho_t}{d\mu} = -\{H, \rho_t\}, \qquad (5)$$

которое отличается от (1.15) знаком перед скобкой Пуассона. Вывод уравнения (5) буквально повторяет вывод уравнения (1.15), а разница в знаке возникает за счет того, что $G_{-t}\mu$ удовлетворяет уравнениям Гамильтона с обращенным временем. Картина движения, в которой зависимость от времени состояний определяется уравнением (5), а наблюдаемые от времени не зависят, называется картиной Лиувилля:

$$\frac{df}{dt} = 0, \qquad \frac{d\rho_t}{dt} = -\{H, \rho_t\}.$$

Уравнение (5) называется уравнением Лиувилля. Из самого способа введения картины Лиувилля очевидно, что

$$\langle f_t | \omega \rangle = \langle f | \omega_t \rangle.$$

Эта формула выражает эквивалентность двух картин движения. Средние значения наблюдаемых зависят от времени одинаково, а разница между картинами только в способе описания этой зависимости. Заметим, что в статистической физике обычно используется картина Лиувилля.

---

* В курсах механики обычно рассматриваются только чистые состояния. При этом не делается различия между зависимостью от времени абстрактной наблюдаемой в картине Гамильтона и изменением ее среднего значения.

§ 4. Физические основы квантовой механики

Квантовая механика — это механика микромира. Явления, которые она изучает, в основном лежат за пределами нашего чувственного восприятия, поэтому не следует удивляться кажущейся парадоксальности законов, управляющих этими явлениями.

Основные законы квантовой механики не удается сформулировать как логическое следствие результатов некоторой совокупности фундаментальных физических экспериментов. Иными словами, до сих пор неизвестна формулировка квантовой механики, основанная на системе проверенных на опыте аксиом. Более того, некоторые из основных положений квантовой механики принципиально не допускают опытной проверки. Наша уверенность в справедливости квантовой механики основана на том, что все физические результаты теории согласуются с экспериментом. Таким образом, на опыте проверяются только следствия из основных положений квантовой механики, а не ее основные законы. С этими обстоятельствами связаны, по-видимому, главные трудности, возникающие при первоначальном изучении квантовой механики.

Такого же характера, но, очевидно, гораздо большие трудности стояли перед создателями квантовой механики. Эксперименты со всей определенностью указывали на существование особых квантовых закономерностей в микромире, но ни в коей мере не подсказывали форму квантовой теории. Этим можно объяснить поистине драматическую историю создания квантовой механики и, в частности, тот факт, что первоначальные формулировки квантовой механики носили чисто рецептурный характер. Они содержали некоторые правила, позволяющие вычислять измеряемые на опыте величины, а физическое истолкование теории появилось после того, как в основном был создан ее математический формализм.

При построении квантовой механики в настоящем курсе мы не будем следовать историческому пути. Мы очень коротко опишем ряд физических явлений, попытки объяснить которые на основе законов классической физики приводили к непреодолимым трудностям. Далее мы попытаемся выяснить, какие черты описанной в предыдущих параграфах схемы классической механики должны сохраниться в механике микромира и от чего можно и нужно отказаться. Мы увидим, что отказ только от одного утверждения классической механики, а именно от утверждения, что наблюдаемые есть функции на фазовом пространстве, позволит построить схему механики, описывающую системы с поведением, существенно отличным от классического. Наконец, в последующих параграфах мы убедимся, что построенная теория является более общей, чем классическая механика, и содержит последнюю как предельный случай.

Исторически первая квантовая гипотеза была выдвинута Планком в 1900 г. в связи с теорией равновесного излучения. Планку удалось получить согласующуюся с опытом формулу для спектрального распределения энергии теплового излучения, выдвинув предположение о том, что электромагнитное излучение испускается и поглощается дискретными порциями — квантами, энергия которых пропорциональна частоте излучения

$$E = \hbar\omega, \tag{1}$$

где $\omega = 2\pi\nu$, ν — частота колебаний в световой волне, а $\hbar = 1{,}05 \times 10^{-27}$ эрг·с — постоянная Планка *.

Гипотеза Планка о световых квантах позволила Эйнштейну дать чрезвычайно простое объяснение закономерностей фотоэффекта (1905 г.). Явление фотоэффекта состоит в том, что под действием светового потока из металла выбиваются электроны. Основная задача теории фотоэффекта — найти зависимость энергии выбиваемых электронов от характеристик светового потока. Пусть V — работа, которую нужно затратить на выбивание электрона из металла (работа выхода). Тогда закон сохранения энергии приводит к соотношению

$$\hbar\omega = V + T,$$

где T — кинетическая энергия выбитого электрона. Мы видим, что эта энергия линейно зависит от частоты и не зависит от интенсивности светового потока. Кроме того, при частоте $\omega < V/\hbar$ (красная граница фотоэффекта) явление фотоэффекта становится невозможным, так как $T \geqslant 0$. Эти выводы, основанные на гипотезе о световых квантах, полностью согласуются с опытом. В то же время по классической теории энергия вырванных электронов должна зависеть от интенсивности световых волн, что противоречит результатам экспериментов.

Эйнштейн дополнил представление о световых квантах, введя импульс светового кванта по формуле

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{k}$ — так называемый волновой вектор, имеющий направление распространения световых волн; длина этого вектора k связана с длиной волны λ, частотой ω и скоростью света c соотношениями

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}. \tag{3}$$

Для световых квантов справедлива формула

$$E = pc,$$

* В старой литературе формула (1) часто записывается в виде $E = h\nu$, постоянная h, входящая в последнюю формулу, очевидно, отличается от $\hbar$ формулы (1) множителем 2π.

являющаяся частным случаем формулы теории относительности

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$$

для частицы с массой покоя $m = 0$.

Заметим, что исторически первые квантовые гипотезы относились к законам излучения и поглощения световых волн, т. е. к электродинамике, а не к механике. Однако вскоре стало ясно, что не только для электромагнитного излучения, но и для атомных систем характерна дискретность значений ряда физических величин. Опыты Франка и Герца (1913 г.) показали, что при столкновениях электронов с атомами энергия электронов изменяется дискретными порциями. Результаты этих опытов можно объяснить тем, что энергия атомов может иметь только определенные дискретные значения. Позднее, в 1922 г. опыты Штерна и Герлаха показали, что аналогичным свойством обладает проекция момента количества движения атомных систем на некоторое направление. В настоящее время хорошо известно, что дискретность значений ряда наблюдаемых хотя и характерная, но не обязательная черта систем микромира. Так, например, энергия электрона в атоме водорода имеет дискретные значения, а энергия свободно движущегося электрона может принимать любые положительные значения. Математический аппарат квантовой механики должен быть приспособлен к описанию наблюдаемых, принимающих как дискретные, так и непрерывные значения.

В 1911 г. Резерфордом было открыто атомное ядро и предложена планетарная модель атома (опыты Резерфорда по рассеянию α-частиц на образцах из различных элементов показали, что атом имеет положительно заряженное ядро, заряд которого равен Ze, где Z — номер элемента в таблице Менделеева, а $-e$ — заряд электрона, размеры ядра не превышают 10^{-12} см; сами атомы имеют линейные размеры порядка 10^{-8} см). Планетарная модель атома противоречит основным положениям классической электродинамики. Действительно, двигаясь вокруг ядра по классическим орбитам, электроны, как всякие ускоренно движущиеся заряды, должны излучать электромагнитные волны. При этом электроны должны терять свою энергию и в конце концов упасть на ядро. Поэтому такой атом не может быть устойчивым, что, конечно, не соответствует действительности. Одна из основных задач квантовой механики — объяснить устойчивость и описать структуру атомов и молекул как систем, состоящих из положительно заряженных ядер и электронов.

Совершенно удивительным с точки зрения классической механики представляется явление дифракции микрочастиц. Это явление было предсказано де Бройлем в 1924 г., который предположил, что свободно движущейся частице с импульсом **p**

и энергией E в каком-то смысле соответствует волна с волновым вектором $\mathbf{k}$ и частотой ω, причем

$$\mathbf{p} = h\mathbf{k}, \qquad E = h\omega,$$

т. е. соотношения (1) и (2) справедливы не только для световых квантов, но и для частиц. Физическое истолкование волн де Бройля было дано позднее Борном, и мы его пока обсуждать не будем. Если движущейся частице соответствует волна, то независимо от того, какой точный смысл вкладывается в эти слова, естественно ожидать, что это проявится в существовании дифракционных явлений для частиц. Впервые дифракция электронов наблюдалась в опытах Девиссона и Джермера в 1927 г. Впоследствии явления дифракции наблюдались и для других частиц.

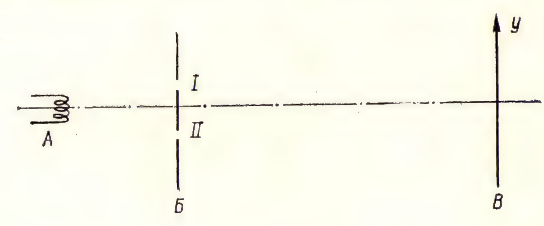


Рис. 1.

Покажем, что дифракционные явления несовместимы с классическими представлениями о движении частиц по траекториям. Рассуждение удобнее всего провести на примере мысленного эксперимента по дифракции пучка электронов на двух щелях *, схема которого изображена на рис. 1. Пусть электроны от источника *А* двигаются к экрану *Б* и, проходя через щели *I* и *II* в нем, попадают на экран *В*.

Нас интересует распределение электронов по координате y, попадающих на экран *В*. Явления дифракции на одной и двух щелях хорошо изучены, и мы можем утверждать, что распределение электронов $\rho(y)$ имеет вид *а*, изображенный на рис. 2, если открыта только первая щель, вид *б* (рис. 2), — если открыта вторая и вид *в*, — если открыты обе щели. Если предположить, что каждый электрон двигался по определенной классической траектории, то все электроны, попавшие на экран *В*, можно разбить на две группы в зависимости от того, через какую щель они прошли. Для электронов первой группы совершенно безразлично, открыта ли вторая щель, и поэтому их

* Такой эксперимент является мысленным, так длина волны электронов при энергиях, удобных для дифракционных опытов, не превышает 10^{-7} см, а расстояние между щелями должно иметь тот же порядок. В реальных экспериментах наблюдается дифракция на кристаллах, которые как бы являются природными дифракционными решетками.

распределение на экране должно изображаться кривой *а*; аналогично электроны второй группы должны иметь распределение *б*. Поэтому в случае, когда открыты обе щели, на экране должно получиться распределение, являющееся суммой распределений *а* и *б*. Такая сумма распределений не имеет ничего общего с интерференционной картиной *в*. Это противоречие показывает, что разделение электронов на группы по тому признаку, через какую щель они прошли, в условиях описанного эксперимента невозможно, а значит, мы вынуждены отказаться от понятия траектории.

Сразу же возникает вопрос, а можно ли так поставить эксперимент, чтобы выяснить, через какую щель проходил электрон. Разумеется, такая постановка эксперимента возможна,

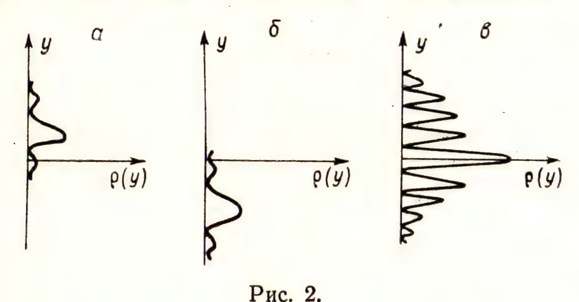


Рис. 2.

для этого достаточно поместить источник света между экранами *Б* и *В* и наблюдать рассеяние световых квантов на электронах. Для того чтобы добиться достаточного разрешения, мы должны использовать кванты с длиной волны, по порядку не превосходящей расстояния между щелями, т. е. с достаточно большой энергией и импульсом. Наблюдая кванты, рассеянные на электронах, мы действительно сможем определить, через какую щель прошел электрон. Однако взаимодействие квантов с электронами вызовет неконтролируемое изменение их импульсов, а следовательно, распределение электронов, попавших на экран, должно измениться. Таким образом, мы приходим к выводу, что ответить на вопрос, через какую щель прошел электрон, можно только за счет изменения как условий, так и окончательного результата эксперимента.

На этом примере мы сталкиваемся со следующей общей особенностью поведения квантовых систем. Экспериментатор не имеет возможности следить за ходом эксперимента, так как это приводит к изменению его окончательного результата. Эта особенность квантового поведения тесно связана с особенностями измерений в микромире. Всякое измерение возможно только при взаимодействии системы с измерительным прибором. Это взаимодействие приводит к возмущению движения системы. В классической физике всегда предполагается, что

это возмущение может быть сделано сколь угодно малым, так же как и длительность процесса измерения. Поэтому всегда возможно одновременное измерение любого числа наблюдаемых.

Детальный анализ процесса измерения некоторых наблюдаемых для микросистем, который можно найти во многих учебниках по квантовой механике, показывает, что с увеличением точности измерения наблюдаемых воздействие на систему увеличивается и измерение вносит неконтролируемые изменения в численные значения некоторых других наблюдаемых. Это приводит к тому, что одновременное точное измерение некоторых наблюдаемых становится принципиально невозможным. Например, если для измерения координаты частицы использовать рассеяние световых квантов, то погрешность такого измерения имеет порядок длины волны света $\Delta x \sim \lambda$. Повысить точность измерения можно, выбирая кванты с меньшей длиной волны, а следовательно, с большим импульсом $p = 2\pi h/\lambda$. При этом в численные значения импульса частицы вносится неконтролируемое изменение Δp порядка импульса кванта. Поэтому погрешности измерения координаты и импульса Δx и Δp связаны соотношением

$$\Delta x \, \Delta p \sim 2\pi h.$$

Более точное рассуждение показывает, что это соотношение связывает только одноименные координату и проекцию импульса. Соотношения, связывающие принципиально возможную точность одновременного измерения двух наблюдаемых, называются соотношениями неопределенности Гейзенберга. В точной формулировке они будут получены в следующих параграфах. Наблюдаемые, на которые соотношения неопределенности не накладывают никаких ограничений, являются одновременно измеримыми. Мы увидим в дальнейшем, что одновременно измеримыми являются декартовы координаты частицы или проекции импульса, а неизмеримыми одновременно — одноименные координаты и проекция импульса или две декартовы проекции момента количества движения. При построении квантовой механики мы должны помнить о возможности существования неизмеримых одновременно величин.

Теперь после небольшого физического вступления попытаемся ответить на уже поставленный вопрос: какие особенности классической механики следует сохранить и от чего естественно отказаться при построении механики микромира. Основными понятиями классической механики были понятия наблюдаемой и состояния. Задача физической теории — предсказание результатов экспериментов, а эксперимент всегда есть измерение некоторой характеристики системы или наблюдаемой при определенных условиях, которые определяют состояние системы. Поэтому понятия наблюдаемой и состояния должны появиться

в любой физической теории. С точки зрения экспериментатора определить наблюдаемую — значит задать способ ее измерения. Наблюдаемые мы будем обозначать символами a, b, c, ... и пока не будем делать никаких предположений об их математической природе (напомним, что в классической механике наблюдаемые есть функции на фазовом пространстве). Множество наблюдаемых, как и прежде, мы будем обозначать через $\mathfrak{A}$.

Разумно предположить, что условия эксперимента определяют по крайней мере вероятностные распределения результатов измерения всех наблюдаемых, поэтому определение состояния, данное в § 2, разумно сохранить. Состояния по-прежнему мы будем обозначать через ω, соответствующую наблюдаемой a вероятностную меру на действительной оси через $\omega_a(E)$, функцию распределения наблюдаемой a в состоянии ω через $\omega_a(\lambda)$ и, наконец, среднее значение наблюдаемой a в состоянии ω через $\langle\omega|a\rangle$.

Теория должна содержать определение функции от наблюдаемой. Для экспериментатора утверждение, что наблюдаемая b есть функция от наблюдаемой a $(b = f(a))$ означает, что для измерения b достаточно измерить a, и, если в результате измерения наблюдаемой a получится число a_0, то численное значение наблюдаемой b есть $b_0 = f(a_0)$. Для соответствующих a и $f(a)$ вероятностных мер справедливо равенство

$$\omega_{f(a)}(E) = \omega_a\left(f^{-1}(E)\right) \tag{4}$$

для любых состояний ω.

Заметим, что всевозможные функции от одной наблюдаемой a измеримы одновременно, так как для измерения этих наблюдаемых достаточно измерить наблюдаемую a. В дальнейшем мы увидим, что в квантовой механике этим примером исчерпываются случаи одновременной измеримости наблюдаемых, т. е. если наблюдаемые b_1, b_2, ... измеримы одновременно, то найдется такая наблюдаемая a и такие функции f_1, f_2, ..., что $b_1 = f_1(a)$, $b_2 = f_2(a)$, ...

Среди множества функций $f(a)$ наблюдаемой a, очевидно, определены $f(a) = \lambda a$ и $f(a) = \mathrm{const}$, где λ — вещественное число. Существование первой из этих функций показывает, что наблюдаемые можно умножать на вещественные числа. Утверждение, что наблюдаемая есть константа подразумевает, что ее численное значение в любом состоянии совпадает с этой константой.

Попытаемся теперь выяснить, какой смысл можно придать сумме $a + b$ и произведению ab наблюдаемых. Эти операции были бы определены, если бы у нас было определение функции от двух наблюдаемых $f(a, b)$. Здесь, однако, возникают принципиальные трудности, связанные с возможностью существования неизмеримых одновременно наблюдаемых. Если a и b

измеримы одновременно, то определение $f(a, b)$ совершенно аналогично определению $f(a)$. Для измерения наблюдаемой $f(a, b)$ достаточно измерить наблюдаемые a и b, и такое измерение приведет к численному значению $f(a_0, b_0)$, где a_0 и b_0 — численные значения наблюдаемых a и b соответственно. Для случая неизмеримых одновременно наблюдаемых a и b не существует никакого разумного определения функции $f(a, b)$. Это обстоятельство заставляет нас отказаться от предположения, что наблюдаемые есть функции на фазовом пространстве $f(q, p)$, так как у нас есть физические основания считать q и p неизмеримыми одновременно и искать наблюдаемые среди математических объектов иной природы.

Мы видим, что определить сумму $a + b$ и произведение ab, используя понятие функции от двух наблюдаемых, можно только в том случае, если они одновременно измеримы. Однако возможен другой подход, позволяющий ввести сумму в общем случае. Мы знаем, что вся информация о состояниях и наблюдаемых получается в результате измерений, поэтому разумно предположить, что состояний достаточно много, чтобы по ним можно было различать наблюдаемые, и аналогично наблюдаемых достаточно много, чтобы по ним можно было различать состояния.

Более точно мы предполагаем, что из равенства

$$\langle a \mid \omega \rangle = \langle b \mid \omega \rangle,$$

справедливого для любого состояния ω, следует, что наблюдаемые a и b совпадают *, а из равенства

$$\langle a \mid \omega_1 \rangle = \langle a \mid \omega_2 \rangle,$$

справедливого для любой наблюдаемой a, следует, что совпадают состояния ω_1 и ω_2.

Первое из сделанных предположений дает возможность определить сумму наблюдаемых $a + b$ как такую наблюдаемую, для которой справедливо равенство

$$\langle a + b \mid \omega \rangle = \langle a \mid \omega \rangle + \langle b \mid \omega \rangle \qquad (5)$$

при любом состоянии ω. Сразу заметим, что это равенство является выражением известной теоремы теории вероятностей о среднем значении суммы только в случае, когда наблюдаемые a и b имеют общую функцию распределения. Такая общая функция распределения может существовать (и в квантовой механике действительно существует) только для одновременно измеримых величин. В этом случае определение суммы по формуле (5) совпадает со сделанным прежде. Аналогичное определение произведения невозможно, так как среднее от произ-

* Это предположение позволяет считать, что наблюдаемая задана, если каждому состоянию сопоставлено вещественное число.

ведения не равно произведению средних даже для одновременно измеримых наблюдаемых.

Определение суммы (5) не содержит никакого указания на способ измерения наблюдаемой $a+b$ по известным способам измерения наблюдаемых a и b и в этом смысле является неявным.

Чтобы дать представление о том, насколько понятие суммы наблюдаемых может отличаться от обычного понятия суммы случайных величин, мы приведем пример наблюдаемой, которая будет подробно изучена в дальнейшем. Пусть

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{\omega^2 Q^2}{2}.$$

Наблюдаемая H (энергия одномерного гармонического осциллятора) есть сумма двух наблюдаемых, пропорциональных квадратам импульса и координаты. Мы увидим, что эти последние наблюдаемые могут принимать любые неотрицательные численные значения, в то время как значения наблюдаемой H должны совпадать с числами $E_n = (n+1/2)\omega$, где $n = 0, 1, 2, \ldots$, т. е. наблюдаемая H с дискретными численными значениями является суммой наблюдаемых с непрерывными значениями.

Таким образом, на множестве наблюдаемых $\mathfrak{A}$ определены две операции: умножение на вещественные числа и сложение; тем самым множество $\mathfrak{A}$ становится линейным пространством. Поскольку на $\mathfrak{A}$ определены вещественные функции и, в частности, квадрат наблюдаемой, то возникает естественное определение произведения наблюдаемых

$$a \circ b = \frac{(a+b)^2 - (a-b)^2}{4}. \qquad (6)$$

Отметим, что произведение $a \circ b$ коммутативно, но, вообще говоря, не ассоциативно. Введение произведения $a \circ b$ превращает множество наблюдаемых $\mathfrak{A}$ в вещественную коммутативную алгебру.

Вспомним, что алгебра наблюдаемых классической механики содержала еще лиевскую операцию — скобка Пуассона $\{f, g\}$. Эта операция появилась в связи с динамикой системы. С введением такой операции каждая наблюдаемая H порождает семейство автоморфизмов алгебры наблюдаемых:

$$U_t \colon \mathfrak{A} \to \mathfrak{A},$$

где $U_t f = f_t$; f_t удовлетворяет уравнению

$$\frac{df_t}{dt} = \{H, f_t\}$$

и начальному условию

$$f_t|_{t=0} = f.$$

Напомним, что отображение U_t является автоморфизмом вследствие того, что скобка Пуассона обладает свойствами

лиевской операции. Тот факт, что наблюдаемые в классической механике являются функциями на фазовом пространстве, здесь роли не играет. Мы предположим, что и алгебра наблюдаемых квантовой механики имеет лиевскую операцию, т. е. каждой паре наблюдаемых a, b сопоставляется наблюдаемая $\{a, b\}$ со свойствами:

$$\{a, b\} = -\{b, a\},$$

$$\{\lambda a + b, c\} = \lambda \{a, c\} + \{b, c\},$$

$$\{a, b \circ c\} = \{a, b\} \circ c + b \circ \{a, c\},$$

$$\{a, \{b, c\}\} + \{b, \{c, a\}\} + \{c, \{a, b\}\} = 0.$$

Кроме того, предположим, что связь лиевской операции с динамикой в квантовой механике такая же, как и в классической. Трудно представить более простой и красивый способ описания динамики, кроме того, однотипное описание динамики в классической и квантовой механике позволяет надеяться на то, что мы построим теорию, содержащую классическую механику как предельный случай.

Фактически все наши предположения сводятся к тому, что при построении квантовой механики разумно сохранить структуру алгебры наблюдаемых классической механики, но следует отказаться от реализации этой алгебры функциями на фазовом пространстве, так как мы допускаем существование неизмеримых одновременно наблюдаемых.

Наша ближайшая задача — убедиться в том, что существует реализация алгебры наблюдаемых, отличная от реализации классической механики. В следующем параграфе мы приведем пример такой реализации, построив конечномерную модель квантовой механики. В этой модели алгебра наблюдаемых $\mathfrak{A}$ есть алгебра самосопряженных операторов в n-мерном комплексном пространстве $\mathbf{C}^n$. Изучая эту упрощенную модель, мы сумеем проследить за основными особенностями квантовой теории. В то же время, дав физическое толкование построенной модели, мы увидим, что она слишком бедна, чтобы соответствовать действительности. Поэтому конечномерную модель нельзя рассматривать как окончательный вариант квантовой механики. Однако усовершенствование этой модели — замена $\mathbf{C}^n$ на комплексное гильбертово пространство будет представляться весьма естественным.

§ 5. Конечномерная модель квантовой механики

Покажем, что алгебра наблюдаемых $\mathfrak{A}$ может быть реализована как алгебра самосопряженных операторов в конечномерном комплексном пространстве $\mathbf{C}^n$.

Векторы пространства $\mathbf{C}^n$ будем обозначать греческими буквами ξ, η, φ, ψ, ... Напомним основные свойства скалярного

произведения:

$$1)\qquad (\xi, \psi) = \overline{(\psi, \xi)},$$
$$2)\qquad (\xi + \lambda\eta, \psi) = (\xi, \psi) + \lambda(\eta, \psi), \qquad (1)$$
$$3)\qquad (\xi, \xi) > 0 \quad \text{при} \quad \xi \neq 0.$$

Здесь λ — комплексное число.

Векторы $e_1, \ldots, e_n$ образуют ортонормированный* базис в $\mathbf{C}^n$, если

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}, \qquad (2)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера.

Разложение произвольного вектора ξ по векторам базиса $e_1, \ldots, e_n$ имеет вид

$$\xi = \sum_{i=1}^{n} \xi_i e_i, \qquad \xi_i = (\xi, e_i). \qquad (3)$$

Вектор ξ однозначно определяется числами $\xi_1, \ldots, \xi_n$

$$\xi \longleftrightarrow (\xi_1, \ldots, \xi_n).$$

Если выбран базис, то тем самым выбрана конкретная реализация для векторов или задано представление. Пусть $e_1, \ldots, e_n$ — базис, тогда векторы

$$e'_i = \sum_{k=1}^{n} U_{ik} e_k, \qquad i = 1, 2, \ldots, n \qquad (4)$$

тоже образуют базис, если матрица $U = \{U_{ik}\}$ обратима и

$$U^{-1}_{ik} = \bar{U}_{ki}. \qquad (5)$$

Матрица, для элементов которой справедливо равенство (5), называется унитарной. Переход от одного базиса к другому есть унитарное преобразование.

Если выбрано представление, то для скалярного произведения справедлива формула

$$(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \bar{\eta}_i. \qquad (6)$$

Операторы в заданном базисе представляются матрицами

$$A \longleftrightarrow \{A_{lk}\}, \qquad A_{lk} = (Ae_k, e_l). \qquad (7)$$

Действительно, пусть $\eta = A\xi$, тогда $\eta_l = (A\xi, e_l) = \left(A \sum_{k=1}^{n} \xi_k e_k, e_l\right) = \sum_{k=1}^{n} \xi_k (Ae_k, e_l) = \sum_{k=1}^{n} A_{lk}\xi_k$. Оператор A^* называется сопряжен-

* В дальнейшем слово «ортонормированный» мы часто будем опускать, так как другие базисы мы не рассматриваем.

ным оператору A, если для любой пары векторов ξ и η справедливо равенство

$$(A\xi, \eta) = (\xi, A^*\eta). \tag{8}$$

Очевидно, что $A^*_{ik} = \bar{A}_{ki}$. Оператор называется самосопряженным, если $A^* = A$. Для самосопряженного оператора $A_{ik} = \bar{A}_{ki}$. Непосредственно из определения сопряженного оператора следуют равенства

$$(AB)^* = B^*A^*, \qquad (\alpha A)^* = \bar{\alpha} A^*, \tag{9}$$

где α — комплексное число.

Построим реализацию алгебры наблюдаемых. Пусть $\mathfrak{A}$ — множество самосопряженных операторов в $\mathbf{C}^n$. В дальнейшем самосопряженные операторы мы часто будем называть наблюдаемыми. На множестве операторов обычным образом определены операции сложения и умножения на число. Если $A \in \mathfrak{A}$, $B \in \mathfrak{A}$, $\lambda \in \mathbf{R}$, то $(A + B) \in \mathfrak{A}$ и $\lambda A \in \mathfrak{A}$, так как $(A + B)^* = A + B$ и $(\lambda A)^* = \lambda A$. Естественно эти операции считать операциями сложения наблюдаемых и умножения на число.

Следующая наша задача — научиться строить функции от наблюдаемых. Можно предположить, что здесь годится обычное определение функции от оператора. Это предположение мы сможем оправдать после того, как научимся строить вероятностные распределения для наблюдаемых в квантовой механике. Тогда мы сумеем проверить формулу $\omega_{f(A)}(E) = \omega_A(f^{-1}(E))$, эквивалентную общему определению функции от наблюдаемой, данному в предыдущем параграфе.

Напомним, что существует несколько эквивалентных определений функции от оператора. Если для $f(x)$ на всей вещественной оси справедливо разложение в степенной ряд

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n, \tag{10}$$

то $f(A)$ определяется формулой

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n. \tag{11}$$

Второе определение использует существование у самосопряженных операторов собственного базиса *

$$A\varphi_i = a_i\varphi_i, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

* Напомним, что собственные числа самосопряженного оператора вещественны, а собственные векторы, соответствующие разным собственным значениям, ортогональны. Если собственное значение имеет кратность r, то ему соответствует r линейно-независимых собственных векторов, которые всегда можно выбрать ортонормированными.

Здесь φ_i — собственные векторы, $(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$, а a_i — собственные значения оператора A. Для определения линейного оператора $f(A)$ достаточно определить результат действия $f(A)$ на векторы базиса. По определению

$$f(A)\varphi_i = f(a_i)\varphi_i. \tag{12}$$

В собственном базисе матрица A диагональна, и на диагонали стоят собственные значения, т. е. $A_{ij} = a_i\delta_{ij}$. В этом же представлении $[f(A)]_{ij} = f(a_i)\delta_{ij}$. Заметим, что вещественной функции соответствует самосопряженный оператор, т. е. $f(A) \in \mathfrak{A}$.

Операция $A \circ B$ определяется формулой (4.6), которая для самосопряженных операторов имеет вид

$$A \circ B = \frac{(A+B)^2 - (A-B)^2}{4} = \frac{AB + BA}{2}. \tag{13}$$

Самосопряженность оператора $A \circ B$ очевидна.

Нам осталось построить лиевскую операцию. Для этого рассмотрим коммутатор операторов A и B $[A, B] = AB - BA$. Операция $[AB]$ обладает следующими свойствами:

$$\begin{aligned}
&1) \quad [AB] = -[B, A],\\
&2) \quad [A + \lambda B, C] = [AC] + \lambda[B, C],\\
&3) \quad [A, B \circ C] = [A, B] \circ C + B \circ [A, C],\\
&4) \quad [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.
\end{aligned} \tag{14}$$

Все эти свойства проверяются непосредственным вычислением. Заметим, что свойство 3) справедливо и для несимметризованного произведения. Действительно,

$$[A, BC] = ABC - BCA + BAC - BAC = [A, B]C + B[A, C].$$

Мы видим, что коммутатор обладает свойствами лиевской операции, но $[A, B]$ не является самосопряженным оператором, т. е. $[A, B] \overline{\in} \mathfrak{A}$. Однако выражение $(i/h)[A, B]$, которое отличается от коммутатора чисто мнимым множителем i/h, удовлетворяет всем требованиям. Отметим, что алгебры $\mathfrak{A}$, построенные с разными постоянными h, неизоморфны друг другу. Выбор h может быть сделан только после сравнения теории с экспериментом. Это сравнение показывает, что константа h совпадает с постоянной Планка. В дальнейшем мы будем использовать обозначение

$$\{A, B\}_h = \frac{i}{h}[A, B] \tag{15}$$

и называть $\{A, B\}_h$ квантовой скобкой Пуассона.

Интересно отметить, что в классической механике мы могли бы вместо

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p}$$

определить скобку Пуассона равенством

$$\{f, g\} = \alpha\left(\frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p}\right),$$

где α — вещественная постоянная. Нетрудно видеть, однако, что новое определение скобки Пуассона в классической механике приведет к алгебре изоморфной исходной. Действительно, замена переменных $p = \sqrt{|\alpha|}\,p'$, $q = \operatorname{sign}\alpha\,\sqrt{|\alpha|}\,q'$ возвращает нас к старому определению.

Важную роль в квантовой механике играет след оператора $\operatorname{Tr} A$. По определению

$$\operatorname{Tr} A = \sum_{i=1}^{n} A_{ii} = \sum_{i=1}^{n} (Ae_i, e_i).$$

Напомним основные свойства этой операции. След не зависит от выбора базиса. В частности, если взять собственный базис оператора A, то

$$\operatorname{Tr} A = \sum_{i=1}^{n} a_i,$$

т. е. след является суммой собственных чисел. Если a_i — кратное собственное значение, то оно входит слагаемым в сумму столько раз, какова его кратность.

След произведения двух операторов не зависит от порядка сомножителей

$$\operatorname{Tr} AB = \operatorname{Tr} BA.$$

В случае большего числа сомножителей допустима их циклическая перестановка под знаком Tr

$$\operatorname{Tr} ABC = \operatorname{Tr} BCA.$$

След самосопряженной матрицы — вещественное число, так как собственные значения ее вещественны.

§ 6. Состояния в квантовой механике

В этом параграфе мы покажем, как задаются состояния в квантовой механике. Напомним, что мы сохранили определение состояния, приведенное в § 2. Там же было показано, что задание вероятностных распределений эквивалентно заданию средних значений для всех наблюдаемых. Рассуждения, которые привели нас к этому результату, сохраняют свою силу

и в квантовой механике, так как они не использовали конкретной реализации алгебры наблюдаемых классической механики. Задать состояние — это значит задать функционал $\langle\omega|A\rangle$ на алгебре наблюдаемых $\mathfrak{A}$ со следующими свойствами:

$$\begin{aligned} &1) \quad \langle\lambda A + B\,|\,\omega\rangle = \lambda\,\langle A\,|\,\omega\rangle + \langle B\,|\,\omega\rangle, \\ &2) \quad \langle A^2\,|\,\omega\rangle \geqslant 0, \\ &3) \quad \langle C\,|\,\omega\rangle = C, \\ &4) \quad \overline{\langle A\,|\,\omega\rangle} = \langle A\,|\,\omega\rangle. \end{aligned} \tag{1}$$

Свойство 1) мы уже обсуждали. Свойство 2) выражает тот факт, что для наблюдаемой A^2, которая по своему смыслу неотрицательна, среднее значение не может быть отрицательным числом. Свойство 3) утверждает, что среднее значение наблюдаемой C в любом состоянии совпадает с этой константой. Наконец, по свойству 4) средние значения вещественны. Таким образом, состояние в квантовой механике есть положительный, линейный функционал на алгебре самосопряженных операторов $\mathfrak{A}$. Общая форма такого функционала

$$\langle A\,|\,\omega\rangle = \operatorname{Tr} MA, \tag{2}$$

где M — оператор в $\mathbf{C}^n$, удовлетворяющий условиям:

$$\begin{aligned} &1) \quad M^* = M, \\ &2) \quad (M\xi,\ \xi) \geqslant 0, \\ &3) \quad \operatorname{Tr} M = 1. \end{aligned} \tag{3}$$

Оператор M называется матрицей плотности и играет в квантовой механике ту же роль, что и функция распределения $\rho(q, p)$ в классической.

Покажем, что свойства матрицы плотности — следствие сформулированных выше свойств функционала усреднения $\langle A|\omega\rangle$. Действительно, из вещественности функционала $\langle A|\omega\rangle$ следует

$$\overline{\operatorname{Tr} AM} = \sum_{i,\ k=1}^{n} \overline{A_{ik}M_{ki}} = \sum_{i,\ k=1}^{n} A^*_{ki}M^*_{ik} = \\ = \sum_{i,\ k=1}^{n} A_{ki}M^*_{ik} = \operatorname{Tr} AM^* = \operatorname{Tr} AM.$$

Полагая $X = A_1 + iA_2$, где A_1 и A_2 — самосопряженные операторы, получаем из последнего равенства

$$\operatorname{Tr} XM = \operatorname{Tr} XM^*,$$

где X — произвольный оператор в $\mathbf{C}^n$. Из произвольности оператора X сразу следует свойство 1).

Теперь используем положительность функционала $\langle A|\omega\rangle$

$$\operatorname{Tr} A^2M \geqslant 0.$$

Положим $A = P_\eta$, где P_η — оператор проектирования на нормированный вектор η $(\|\eta\| = 1)$,

$$P_\eta \xi = (\xi, \eta)\eta.$$

Для вычисления следа удобен любой базис, в котором первый базисный вектор совпадает с η $(e_1 = \eta, e_2, \ldots, e_n)$, тогда

$$\operatorname{Tr} P_\eta^2 M = \operatorname{Tr} P_\eta M = (M\eta, \eta) \geqslant 0.$$

Мы видим, что положительность матрицы плотности является необходимым условием для положительности функционала $\langle A | \omega \rangle$. Достаточность проверяется следующим образом:

$$\operatorname{Tr} A^2 M = \operatorname{Tr} AMA = \sum_{i=1}^{n} (AMAe_i, e_i) = \sum_{i=1}^{n} (MAe_i, Ae_i) \geqslant 0,$$

так как каждое слагаемое под знаком суммы неотрицательно.

Наконец, условие нормировки матрицы плотности $\operatorname{Tr} M = 1$ сразу следует из свойства 3) функционала.

Таким образом, мы показали, что состояния в квантовой механике описываются положительными самосопряженными операторами со следом, равным единице. (Напомним, что в классической механике состояние задается неотрицательной функцией $\rho(q, p)$, нормированной условием $\int \rho(q, p)\, dq\, dp = 1.$)

Любой оператор M со свойствами (18) описывает некоторое состояние системы, т. е. между множеством состояний и множеством матриц плотности M существует взаимно-однозначное соответствие

$$\omega \leftrightarrow M.$$

Если M_1 и M_2 — операторы со свойствами (3), то очевидно, что их выпуклая комбинация

$$M = \alpha M_1 + (1 - \alpha) M_2, \qquad 0 < \alpha < 1$$

также обладает этими свойствами и, следовательно, соответствует некоторому состоянию

$$\omega = \alpha\omega_1 + (1 - \alpha)\omega_2.$$

Мы видим, что множество состояний в квантовой механике является выпуклым.

Всем требованиям к матрице плотности удовлетворяет одномерный проектор P_ψ, $(\|\psi\| = 1)$. Действительно,

1) $(P_\psi \xi, \eta) = (\xi, \psi)(\psi, \eta) = \overline{(\eta, \psi)}(\xi, \psi) = (\xi, P_\psi \eta)$,

2) $(P_\psi \xi, \xi) = (\xi, \psi)(\psi, \xi) = |(\xi, \psi)|^2 \geqslant 0$,

3) $\operatorname{Tr} P_\psi = (\psi, \psi) = 1$.

В конце параграфа мы покажем, что состояние P_ψ не раскладывается в выпуклую комбинацию других состояний, т. е.

является чистым. (Напомним, что в классической механике чистое состояние имеет функцию распределения $\rho(q, p) = \delta(q - q_0)\delta(p - p_0)$.) Заметим, что чистое состояние определяется заданием вектора ψ, однако между чистыми состояниями и векторами нет взаимно-однозначного соответствия, так как если ψ' отличается от ψ численным множителем по модулю равным единице, то $P_{\psi'} = P_{\psi}$. Таким образом, чистому состоянию соответствует класс нормированных на единицу векторов, отличающихся друг от друга множителем $e^{i\alpha}$, где $\alpha \in \mathbf{R}$.

Вектор ψ обычно называют вектором состояния, а пространство, в котором действуют самосопряженные операторы (наблюдаемые), пространством состояний. Пока в качестве пространства состояний мы взяли пространство $\mathbf{C}^n$.

Покажем, что любое состояние в квантовой механике является выпуклой комбинацией чистых состояний. Для этого заметим, что M, как всякий самосопряженный оператор, имеет собственный базис

$$M\varphi_i = \mu_i\varphi_i.$$

Разложим произвольный вектор ξ по этому базису и подействуем на него оператором M,

$$\xi = \sum_{i=1}^{n} (\xi, \varphi_i)\,\varphi_i,$$

$$M\xi = \sum_{i=1}^{n}\mu_i(\xi, \varphi_i)\,\varphi_i = \sum_{i=1}^{n}\mu_i P_{\varphi_i}\xi.$$

В силу произвольности ξ

$$M = \sum_{i=1}\mu_i P_{\varphi_i}. \tag{4}$$

Все числа μ_i неотрицательны, так как они являются собственными значениями положительного оператора. Кроме того, $\sum_{i=1}^{n}\mu_i = \operatorname{Tr} M = 1$ и, следовательно, состояние M действительно является выпуклой комбинацией чистых состояний P_{φ_i}. Для среднего значения наблюдаемой в чистом состоянии $\omega \longleftrightarrow P_{\psi}$ формула (2) принимает вид

$$\langle A \mid \omega\rangle = (A\psi, \psi), \ \|\psi\| = 1. \tag{5}$$

Для случая смешанного состояния $\omega \longleftrightarrow M = \sum_{i=1}^{n}\mu_i P_{\varphi_i}$ имеем

$$\langle A \mid \omega\rangle = \sum_{i=1}^{n}\mu_i\,(A\varphi_i, \varphi_i). \tag{6}$$

Эта формула показывает, что так же как и в классической механике, утверждение о том, что система находится в смешанном состоянии $M=\sum_{i=1}^{n}\mu_i P_{\varphi_i}$ равносильно утверждению, что система с вероятностями μ_i, $i=1, \ldots, n$ находится в чистых состояниях P_{φ_i}.

В заключение этого параграфа докажем, что состояние, описываемое матрицей плотности $M=P_\psi$, является чистым. Нам нужно показать, что из равенства

$$P_\psi=\alpha M_1+(1-\alpha)M_2, \quad 0<\alpha<1 \tag{7}$$

следует, что $M_1=M_2=P_\psi$.

При доказательстве используем, что для положительного оператора A и произвольных векторов φ и ψ справедливо неравенство

$$|(A\varphi, \psi)|^2 \leqslant (A\varphi, \varphi)(A\psi, \psi). \tag{8}$$

Из (8) следует, что $A\varphi=0$, если $(A\varphi, \varphi)=0$. (Неравенство (8) есть условие положительности формы Эрмита: $(A(a\varphi+b\psi), a\varphi+b\psi)=(A\varphi, \varphi)a\bar{a}+(A\varphi, \psi)a\bar{b}+(A\psi, \varphi)\bar{a}b+(A\psi, \psi)b\bar{b}\geqslant 0$, где a и b — комплексные числа.)

Обозначим через $\mathcal{H}_1$ подпространство, ортогональное вектору ψ, тогда $P_\psi\varphi=0$, если $\varphi\in\mathcal{H}_1$. Используя положительность операторов M_1 и M_2 и (7), имеем

$$0\leqslant\alpha(M_1\varphi, \varphi)\leqslant\alpha(M_1\varphi, \varphi)+(1-\alpha)(M_2\varphi, \varphi)=(P_\psi\varphi, \varphi)=0,$$

т. е. $M_1\varphi=0$. Используя самосопряженность M_1, получим для произвольного вектора ξ

$$(M_1\varphi, \xi)=(\varphi, M_1\xi)=0, \quad \varphi\in\mathcal{H}_1,$$

поэтому $M_1\xi=C_\xi\psi$ и, в частности $M_1\psi=C_\psi\psi$. Здесь C_ξ — константа, зависящая от вектора ξ. Произвольный вектор ξ можно представить в виде

$$\xi=(\xi, \psi)\psi+\varphi, \quad \varphi\in\mathcal{H}_1,$$

поэтому $M_1\xi=C_\psi P_\psi\xi$, т. е. $M_1=C_\psi P_\psi$. Наконец, из условия $\operatorname{Tr} M_1=1$ получаем, что $C_\psi=1$, следовательно, $M_1=P_\psi$ и $M_2=P_\psi$.

Можно проверить и обратное утверждение. Если состояние является чистым, то существует вектор $\psi\in\mathbf{C}^n$, $\|\psi\|=1$ такой, что $M=P_\psi$.

§ 7. Соотношения неопределенности Гейзенберга

В этом параграфе мы покажем, как соотношения неопределенности, которые упоминались в § 4, следуют из математического аппарата квантовой механики, и дадим их точную формулировку.

Рассмотрим дисперсии двух наблюдаемых A и B в состоянии ω. Напомним, что дисперсия наблюдаемой определяется соотношением

$$\Delta_\omega^2 A = \langle \omega \mid (A - A_{\text{ср}}) \mid^2 \rangle = \langle \omega \mid A^2 \rangle - \langle \omega \mid A \rangle^2,$$

где $A_{\text{ср}} = \langle \omega \mid A \rangle$. Через $\Delta_\omega A$ мы обозначаем $\sqrt{\Delta_\omega^2 A}$.

Соотношения неопределенности утверждают, что для любого состояния ω справедливо неравенство

$$\Delta_\omega A \, \Delta_\omega B \geqslant \frac{h}{2} \mid \langle \{A, B\}_h \mid \omega \rangle \mid. \tag{1}$$

Соотношения неопределенности достаточно доказать для чистых состояний. Для смешанных состояний они будут следовать тогда из неравенства (2.17), которое справедливо и в квантовой механике, так как его вывод не зависит от реализации алгебры наблюдаемых.

Начнем с очевидного неравенства

$$((A + i\alpha B)\,\psi,\ (A + i\alpha B)\,\psi) \geqslant 0,\ \|\psi\| = 1, \quad \alpha \in R.$$

Раскрывая левую часть, получим

$$(A^2\psi, \psi) + \alpha^2 (B^2\psi, \psi) - i\alpha\,((AB - BA)\,\psi, \psi) \geqslant 0.$$

Используя определение квантовой скобки Пуассона (5.15) и формулу для среднего значения наблюдаемой в чистом состоянии $\omega \leftrightarrow P_\psi$ (6.5), перепишем последнее неравенство в виде

$$\langle A^2 \mid \omega \rangle + \alpha^2 \langle B^2 \mid \omega \rangle - \alpha h \langle \{A, B\}_h \mid \omega \rangle \geqslant 0$$

при любом $\alpha \in \mathbf{R}$ и, следовательно,

$$\langle A^2 \mid \omega \rangle \langle B^2 \mid \omega \rangle \geqslant \frac{h^2}{4} \langle \{A, B\}_h \mid \omega \rangle^2.$$

Соотношения неопределенности (1) непосредственно следуют из этого неравенства, если сделать замену $A \to A - A_{\text{ср}}$, $B \to B - B_{\text{ср}}$ и учесть, что $\{A, B\}_h = \{(A - A_{\text{ср}}),\ (B - B_{\text{ср}})\}_h$.

Соотношения неопределенности показывают, что дисперсии двух наблюдаемых могут обратиться в нуль одновременно только в том случае, когда среднее значение скобки Пуассона равно нулю. Для коммутирующих наблюдаемых $\{A, B\}_h = 0$ и правая часть равна нулю для всех состояний. В этом случае соотношения неопределенности не накладывают никаких ограничений, и такие наблюдаемые являются одновременно измеримыми. В дальнейшем мы увидим, что действительно существует принципиально возможный способ одновременного измерения таких наблюдаемых. Наиболее сильные ограничения накладываются на пары наблюдаемых, для которых $\langle \{A, B\}_h \mid \omega \rangle \neq 0$ для всех ω, например, если $\{A, B\}_h = \text{const}$. В этом случае не существует состояний, в которых дисперсии

обеих наблюдаемых равны нулю. Мы увидим в дальнейшем, что для одноименных координаты и проекции импульса

$$\{P, Q\}_h = I,$$

где I — единичный оператор. Соотношения неопределенности для этих наблюдаемых принимают вид

$$\Delta_\omega P \Delta_\omega Q \geqslant h/2,$$

т. е. в природе не существует состояний, в которых координата и одноименная проекция импульса имеют одновременно вполне определенные значения. Это утверждение справедливо как для смешанных, так и для чистых состояний, поэтому чистые состояния квантовой механики в отличие от чистых состояний классической механики не являются состояниями с нулевой дисперсией всех наблюдаемых.

Мы можем теперь вернуться к вопросу, поставленному в начале § 2: чем можно объяснить неоднозначность результатов экспериментов. Мы видели, что в классической механике такая неоднозначность связана только с условиями эксперимента. Если в условия эксперимента включить достаточное число предварительных измерений, то мы сможем быть уверены, что система находится в чистом состоянии и результаты любого эксперимента полностью детерминированы. В квантовой механике ответ на этот вопрос оказывается совершенно другим. Соотношения неопределенности показывают, что не существует даже принципиальной возможности поставить эксперимент так, чтобы результаты всех измерений были определены однозначно условиями эксперимента. Мы вынуждены, таким образом, считать, что вероятностный характер предсказаний в микромире связан с физическими свойствами квантовых систем.

Эти выводы кажутся настолько неожиданными, что интересным представляется вопрос о возможности введения в теорию так называемых «скрытых параметров». Можно предположить, что описание состояния системы при помощи матрицы плотности $M = P_\psi$ не является полным, т. е. кроме P_ψ следовало бы задать значения каких-то параметров* x («скрытых параметров»); тогда описание станет достаточным для однозначного предсказания результатов любого измерения. Вероятностный же характер предсказаний в состоянии $\omega \longleftrightarrow P_\psi$ тогда можно объяснить тем, что нам неизвестны значения скрытых параметров и по ним существует какое-то вероятностное распределение. Если обозначить состояния, задаваемые парой (P_ψ, x) через ω_x,

---

* «Скрытые параметры» x можно рассматривать как элементы некоторого множества X. Относительно физической природы этих параметров мы не делаем никаких предположений, так как она безразлична для дальнейших рассуждений.

то наше предположение сводится к тому, что состояние ω есть выпуклая комбинация состояний ω_x. Мы знаем, что P_ψ не раскладывается в выпуклую комбинацию операторов со свойствами матрицы плотности, т. е. состояниям ω_x не соответствуют никакие операторы M. Способ описания состояний в квантовой механике определяется выбором алгебры наблюдаемых. Предположение о том, что существуют состояния, которым не соответствуют никакие матрицы плотности, заставляет нас отказаться от утверждения, что наблюдаемые есть самосопряженные операторы, т. е. отказаться от основного предположения квантовой механики. Таким образом, мы видим, что введение скрытых параметров в квантовую механику невозможно без коренной перестройки ее основ.

§ 8. Физический смысл собственных значений и собственных векторов наблюдаемых

В этом параграфе мы рассмотрим вопросы, касающиеся физического толкования теории. Прежде всего мы должны научиться строить функции распределения для наблюдаемых в заданном состоянии. Мы знаем общую формулу

$$\omega_A(\lambda) = \langle \theta(\lambda - A) | \omega \rangle, \quad (1)$$

где $\theta(x)$ — функция Хевисайда. Чтобы построить функцию от наблюдаемой $\theta(\lambda - A)$, рассмотрим уравнение

$$A\varphi_i = a_i\varphi_i.$$

Только для простоты рассуждений пока предположим, что все собственные значения различны, т. е. спектр оператора A простой, и занумеруем собственные значения в порядке их возрастания $a_1 < \ldots < a_n$. Через P_{φ_i} обозначим операторы проектирования на собственные векторы. Введем оператор

$$P_A(\lambda) = \sum_{a_i \leqslant \lambda} P_{\varphi_i} \quad (2)$$

(значок i под знаком суммы принимает значения, удовлетворяющие условию $a_i \leqslant \lambda$). Покажем, что

$$P_A(\lambda) = \theta(\lambda - A). \quad (3)$$

Для проверки этого равенства достаточно убедиться, что операторы $P_A(\lambda)$ и $\theta(\lambda - A)$ одинаково действуют на базисные векторы φ_i. Используя определение функции от оператора, имеем

$$\theta(\lambda - A)\varphi_j = \theta(\lambda - a_j)\varphi_j = \begin{cases} \varphi_j, & \lambda \geqslant a_j, \\ 0, & \lambda < a_j. \end{cases}$$

С другой стороны,

$$P_A(\lambda)\varphi_j = \sum_{a_i \leqslant \lambda} P_{\varphi_i}\varphi_j = \begin{cases} \varphi_j, & \lambda \geqslant a_j, \\ 0, & \lambda < a_j. \end{cases}$$

Последнее равенство написано с учетом того, что $P_{\varphi_i}\varphi_j = \delta_{ij}\varphi_j$ и оператор P_{φ_j} появится под знаком суммы только при условии $\lambda \geqslant a_j$. Легко проверить, что $P_A(\lambda)$ — проектор, т. е. $P_A^*(\lambda) = P_A(\lambda)$ и $P_A^2(\lambda) = P_A(\lambda)$. Очевидно, что $P_A(\lambda) = 0$ при $\lambda < a_1$ и $P_A(\lambda) = 1$ при $\lambda \geqslant a_n$. Оператор $P_A(\lambda)$ называется спектральной функцией оператора A.

Теперь нетрудно получить явный вид для функции распределения $\omega_A(\lambda)$, $\omega \leftrightarrow M$,

$$\omega_A(\lambda) = \langle P_A(\lambda)\,|\,\omega\rangle = \operatorname{Tr} MP_A(\lambda) = \\ = \operatorname{Tr} M \sum_{a_i \leqslant \lambda} P_{\varphi_i} = \sum_{a_i \leqslant \lambda} \operatorname{Tr} MP_{\varphi_i}$$

окончательно

$$\omega_A(\lambda) = \sum_{a_i \leqslant \lambda} (M\varphi_i, \varphi_i). \tag{4}$$

Напомним, что $(M\varphi_i, \varphi_i) \geqslant 0$. Мы видим, что $\omega_A(\lambda)$ — кусочно-постоянная функция, имеющая скачки при значениях λ, совпадающих с собственными числами, и непрерывная в этих точках справа. График ее изображен на рис. 3.

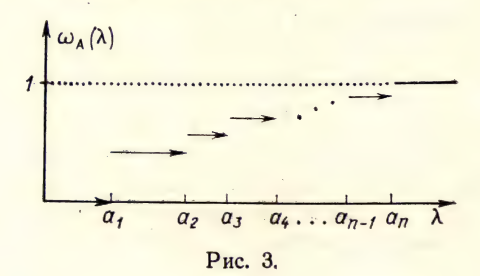


Рис. 3.

Из вида функции распределения следует, что отличной от нуля является вероятность получить значение наблюдаемой A, совпадающее только с одним из собственных чисел. Вероятность W_i при измерении получить значение a_i равна величине скачка функции $\omega_A(\lambda)$ в этой точке

$$W_i = (M\varphi_i, \varphi_i). \tag{5}$$

Сумма W_i, как и следует ожидать, равна единице, так как

$$\sum_{i=1}^{n} W_i = \operatorname{Tr} M = 1.$$

Для чистого состояния $\omega \leftrightarrow P_\psi$ формула (5) принимает вид

$$W_i = |(\psi, \varphi_i)|^2. \qquad (6)$$

Наконец, если система находится в состоянии P_{φ_j}, т. е. в чистом состоянии, определяемом одним из собственных векторов наблюдаемой A, то по формуле (6) $W_i = \delta_{ij}$. В таком чистом состоянии при измерении наблюдаемой A с достоверностью получится число a_i.

Пока мы предполагали, что оператор A имеет простой спектр. Обобщение полученных результатов на случай кратного спектра, когда собственному значению a_i соответствует несколько собственных векторов $\varphi_i^{(1)}, \varphi_i^{(2)}, \ldots, \varphi_i^{(r)}$, труда не представляет. Достаточно заменить проекторы P_{φ_i} на операторы P_i, проектирующие на собственные подпространства, соответствующие собственным значениям a_i

$$P_i\Psi = \sum_{k=1}^{r} \left(\psi, \varphi_i^{(k)}\right) \varphi_i^{(k)}.$$

Тогда вероятность при измерении наблюдаемой A получить значение a_i в общем случае определяется формулой

$$W_i = \sum_{k=1}^{r} \left(M\varphi_i^{(k)}, \varphi_i^{(k)}\right), \qquad (7)$$

а в случае чистого состояния

$$W_i = \sum_{k=1}^{r} \left|\left(\psi, \varphi_i^{(k)}\right)\right|^2. \qquad (8)$$

Теперь мы получили возможность показать, что обычное определение функции от оператора согласуется с данным в § 4 понятием функции от наблюдаемой. Действительно, операторы A и $f(A)$ имеют общую систему собственных векторов

$$A\varphi_i^{(k)} = a_i\varphi_i^{(k)},$$
$$f(A)\varphi_i^{(k)} = f(a_i)\,\varphi_i^{(k)},$$

а число $\sum_{k=1}^{r} \left(M\varphi_i^{(k)}, \varphi_i^{(k)}\right)$ одновременно является вероятностью при измерении получить значение a_i для наблюдаемой A и $f(a_i)$ для наблюдаемой $f(A)$. Отсюда сразу следует, что

$$\omega_{f(A)}(E) = \omega_A(f^{-1}(E)).$$

Заметим еще, что в состояниях, определяемых собственными векторами A, наблюдаемые A и $f(A)$ одновременно имеют вполне определенные значения a_i и $f(a_i)$ соответственно.

Мы можем следующим образом подытожить результаты, которые связывают математический аппарат теории с ее физическим толкованием.

1) Наблюдаемая A в состоянии $\omega \leftrightarrow M$ имеет среднее значение

$$\langle A \mid \omega \rangle = \operatorname{Tr} MA$$

и функцию распределения

$$\omega_A(\lambda) = \operatorname{Tr} MP_A(\lambda).$$

Для чистого состояния $M = P_\psi$, $\|\psi\| = 1$

$$\langle A \mid \omega \rangle = (A\psi, \psi),$$

$$\omega_A(\lambda) = (P_A(\lambda)\psi, \psi).$$

2) Множество собственных значений наблюдаемой A совпадает с множеством возможных результатов измерения этой наблюдаемой.

3) Вероятность W_i получить в результате измерения наблюдаемой A число, совпадающее с одним из ее собственных значений, вычисляется по формуле (7) в общем случае и по формуле (8) для чистых состояний.

4) Собственные векторы наблюдаемой A определяют чистые состояния, в которых наблюдаемая с достоверностью принимает значение, равное соответствующему собственному числу.

Мы видим, что построенная модель удовлетворяет многим физическим требованиям к механике микромира, сформулированным в § 4. Она допускает существование неизмеримых одновременно наблюдаемых и объясняет соотношения неопределенности. В рамках этой модели естественно описываются наблюдаемые, имеющие дискретное множество значений. С другой стороны, мы видим и ограниченность такой модели. Любая наблюдаемая не может иметь больше, чем n значений, где n — размерность пространства состояний $\mathbf{C}^n$ и, следовательно, эта модель не позволяет описать наблюдаемые с непрерывным множеством значений. Поэтому трудно предположить, что такая модель может описывать реальные физические системы. Однако эти трудности не возникнут, если перейти к $n = \infty$ и в качестве пространства состояний взять комплексное гильбертово пространство, а наблюдаемые считать самосопряженными операторами в этом пространстве. Выбор пространств состояний для конкретных физических систем и правила построения наблюдаемых для них мы обсудим в § 11, а пока продолжим изучение нашей конечномерной модели. Конечномерная модель удобна для нас еще тем, что мы не сталкиваемся с чисто математическими трудностями спектральной теории неограниченных самосопряженных операторов в гильбертовом прост-

рanстве. Заметим, что основные положения этой теории были разработаны фон Нейманом именно в связи с потребностями квантовой механики.

§ 9. Две картины движения в квантовой механике. Уравнение Шредингера. Стационарные состояния

В этом параграфе мы обсудим вопросы динамики квантовых систем. Основное предположение уже по существу было сделано в § 4, когда мы говорили о необходимости введения лиевской операции в алгебре наблюдаемых квантовой механики и о ее связи с динамикой. Поэтому мы прямо начнем с того, что постулируем так называемую картину Гейзенберга. Эта картина является аналогом классической картины Гамильтона. Так же как и в классической механике, в этой картине наблюдаемые A зависят, а состояния $\omega \longleftrightarrow M$ не зависят от времени

$$\frac{dM}{dt} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{dA(t)}{dt} = \{H, A(t)\}_h.$$

Здесь H — оператор полной энергии системы, являющийся аналогом функции Гамильтона классической механики. Оператор H иногда называют оператором Шредингера. Форма записи картины Гейзенберга точно такая же, как картины Гамильтона, только в правой части стоит квантовая скобка Пуассона вместо классической.

Как и в классической механике, уравнение

$$\frac{dA(t)}{dt} = \{H, A(t)\}_h \tag{2}$$

вместе с начальным условием

$$A(t)\,|_{t=0} = A \tag{3}$$

задает однопараметрическое семейство автоморфизмов алгебры наблюдаемых $\mathfrak{A}$.

Зависимость среднего значения от времени определяется формулой

$$\langle A(t)\,|\,\omega\rangle = \operatorname{Tr} A(t)\,M.$$

Уравнение (2) с начальным условием (3) имеет единственное решение, которое может быть записано в виде

$$A(t) = e^{\frac{i}{h}Ht} A e^{-\frac{i}{h}Ht}. \tag{4}$$

Действительно,

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{h}[H, A(t)] = \{H, A(t)\}_h.$$

Выполнение начального условия очевидно.

Оператор $U(t) = e^{-\frac{i}{h}Ht}$, который появился в записи решения (4), называется оператором эволюции. Оператор эволюции является унитарным оператором вследствие самосопряженности оператора H

$$U^*(t) = e^{\frac{i}{h}Ht} = U^{-1}(t).$$

Множество операторов $U(t)$ образует однопараметрическую группу

$$U(t_2)U(t_1) = U(t_1 + t_2), \quad U^{-1}(t) = U(-t).$$

Если наблюдаемые H и A коммутируют, то $\{H, A\}_h = 0$ и среднее значение наблюдаемой A не зависит от времени. Такие наблюдаемые называются квантовыми интегралами движения.

В квантовой механике существует вторая эквивалентная картина движения, являющаяся аналогом классической картины Лиувилля. Для того чтобы сформулировать эту картину, преобразуем формулу для среднего значения

$$\langle A(t) \mid \omega \rangle = \mathrm{Tr}\, U^*(t)\, AU(t)\, M = \mathrm{Tr}\, AU(t)\, MU^*(t) = \mathrm{Tr}\, AM(t) = \\ = \langle A \mid \omega(t) \rangle,$$

где

$$\omega(t) \longleftrightarrow M(t) = U(t)\, MU^*(t) \tag{5}$$

и $M(t)$ является единственным решением уравнения

$$\frac{dM(t)}{dt} = -\{H, M(t)\}_h \tag{6}$$

с начальным условием

$$M(t)\,|_{t=0} = M. \tag{7}$$

Мы пришли к так называемой картине Шредингера. В этой картине зависящими от времени оказываются состояния

$$\frac{dM(t)}{dt} = -\{H, M(t)\}_h,$$

$$\frac{dA}{dt} = 0. \tag{8}$$

По самому способу введения картина Шредингера эквивалентна картине Гейзенберга, так как зависимость средних значений наблюдаемых в этих картинах является одинаковой.

Теперь рассмотрим зависимость от времени чистых состояний в картине Шредингера. Согласно общей формуле (5)

$$P_\psi(t) = U(t)\, P_\psi U^*(t).$$

Подберем зависимость вектора состояний $\psi(t)$ от времени так, чтобы выполнялось равенство

$$P_\psi(t) = P_{\psi(t)}.$$

Проверим, что этому условию удовлетворяет

$$\psi(t) = U(t)\psi. \tag{9}$$

Пусть ξ — произвольный вектор, тогда

$$P_{\psi(t)}\xi = (\xi, \psi(t))\psi(t) = (\xi, U(t)\psi)U(t)\psi =$$
$$= U(t)(U^*(t)\xi, \psi)\psi = U(t)P_\psi U^*(t)\xi = P_\psi(t)\xi.$$

Таким образом, зависимость от времени вектора $\psi(t)$ по формуле (9) гарантирует правильную зависимость от времени чистого состояния. Заметим, что (9) не следует и не может следовать с необходимостью из (5), так как вектор состояния определяется состоянием с точностью до множителя по модулю, равного единице. Несмотря на это, в квантовой механике всегда считается, что зависимость векторов состояния от времени определяется формулой (9). Отметим, что эволюция не меняет нормировки вектора состояния,

$$\|\psi(t)\| = \|\psi\|,$$

так как $U(t)$ — унитарный оператор.

Вектор $\psi(t)$ удовлетворяет уравнению

$$ih\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t) \tag{10}$$

и начальному условию

$$\psi(t)\,|_{t=0} = \psi.$$

Уравнение (10) называется уравнением Шредингера и является основным уравнением квантовой механики.

Рассмотрим теперь состояния, которые в картине Шредингера не зависят от времени. Такие состояния называются стационарными. Очевидно, среднее значение любой наблюдаемой и вероятности ее определенных значений в стационарных состояниях от времени не зависят. Условие стационарности сразу следует из (6) и имеет вид

$$\{H, M\}_h = 0. \tag{11}$$

Рассмотрим чистые стационарные состояния. Из (11) имеем *

$$HP_{\psi(t)} = P_{\psi(t)}H.$$

---

* Заметим, что из независимости $P_{\psi(t)}$ от времени отнюдь не следует, что вектор $\psi(t)$, удовлетворяющий уравнению Шредингера, не зависит от времени.

Подействуем левой и правой частями этого равенства на вектор $\psi(t)$

$$H\psi(t)=(H\psi(t), \psi(t))\psi(t).$$

Число $E=(H\psi(t), \psi(t))=\operatorname{Tr} P_{\psi(t)}H$ от времени не зависит, и мы видим, что при любом t вектор $\psi(t)$ является собственным вектором оператора H с собственным значением E. Поэтому уравнение Шредингера для вектора $\psi(t)$ принимает вид

$$ih\frac{d\psi(t)}{dt}=E\psi(t).$$

Решение этого уравнения:

$$\psi(t)=\psi(0)e^{-\frac{i}{h}Et}. \qquad (12)$$

Таким образом, чистые стационарные состояния — это состояния с определенной энергией, и вектор, определяющий такое состояние, зависит от времени по формуле (12).

Уравнение

$$H\varphi_i=E_i\varphi_i$$

иногда называют стационарным уравнением Шредингера. Основные задачи квантовой механики сводятся к решению этого уравнения. Числа E_i, согласно общему физическому толкованию, есть возможные значения энергии (энергетические уровни) системы. Состояние, соответствующее наименьшему значению энергии E_1, называется основным состоянием системы, остальные состояния — возбужденными. Если известны собственные векторы φ_i оператора H, то легко может быть построено решение задачи Коши для уравнения Шредингера

$$ih\frac{d\psi(t)}{dt}=H\psi(t),$$

$$\psi(t)\,|_{t=0}=\psi.$$

Для этого достаточно разложить вектор ψ по собственному базису оператора H

$$\psi=\sum_{i=1}^{n}c_i\varphi_i, \quad c_i=(\psi, \varphi_i)$$

и использовать формулу (9). Тогда мы получим решение задачи Коши в виде

$$\psi(t)=\sum_{j=1}^{n}c_i\varphi_ie^{-\frac{i}{h}E_it}. \qquad (13)$$

Эту формулу называют обычно формулой разложения решения уравнения Шредингера по стационарным состояниям.

В заключение этого параграфа получим соотношение неопределенности время — энергия. Полагая в (7.1) $B = H$, имеем

$$\Delta_\omega A \, \Delta_\omega H \geqslant \frac{h}{2} \left| \langle \{A, H\}_h \mid \omega \rangle \right|. \tag{14}$$

Вспоминая, что в картине Гейзенберга $\frac{dA}{dt} = \{H, A\}_h$ и используя очевидное равенство $\frac{dA_{\text{ср}}}{dt} = \left\langle \frac{dA}{dt} \middle| \omega \right\rangle$, соотношение (14) перепишем в виде

$$\Delta_\omega A \, \Delta_\omega H \geqslant \frac{h}{2} \left| \frac{dA_{\text{ср}}}{dt} \right|.$$

Введем промежуток времени $\Delta_\omega t_A = \Delta_\omega A \Big/ \left| \frac{dA_{\text{ср}}}{dt} \right|$.

За время $\Delta_\omega t_A$ среднее значение наблюдаемой $A_{\text{ср}}$ смещается на «ширину» распределения $\Delta_\omega A$. Поэтому $\Delta_\omega t_A$ есть характерное для состояния ω и наблюдаемой A время, за которое функция распределения $\omega_A(\lambda)$ успевает заметно измениться. Из неравенства

$$\Delta_\omega t_A \Delta_\omega H \geqslant h/2$$

следует, что множество значений $\Delta_\omega t_A$ для всевозможных наблюдаемых A в состоянии ω ограничено снизу.

Полагая $\Delta t = \inf\limits_{A} \Delta_\omega t_A$ и обозначая $\Delta_\omega H$ через ΔE, получим, что для любого состояния ω справедливо неравенство

$$\Delta E \, \Delta t \geqslant h/2. \tag{15}$$

Это и есть соотношение неопределенности время — энергия. Физический смысл этого соотношения существенно отличается от смысла соотношений неопределенности (7.1). В формуле (7.1) $\Delta_\omega A$ и $\Delta_\omega B$ — неопределенности в значениях наблюдаемых A и B в состоянии ω в один и тот же момент времени. В соотношении (15) ΔE — неопределенность энергии, и она от времени не зависит, а Δt характеризует время, за которое успевает заметно измениться распределение хотя бы одной из наблюдаемых. Чем меньше величина Δt, тем больше состояние ω отличается от стационарного. Для сильно нестационарных состояний Δt мало и неопределенность энергии ΔE должна быть достаточно велика. Наоборот, если $\Delta E = 0$, то $\Delta t = \infty$. В этом случае состояние является стационарным.

§ 10. Квантовая механика реальных систем. Перестановочные соотношения Гейзенберга

Мы уже упоминали о том, что построенная конечномерная модель слишком бедна, чтобы соответствовать реальности, и что ее можно усовершенствовать, взяв в качестве пространства состояний комплексное гильбертово пространство $\mathscr{H}$, а в каче-

стве наблюдаемых — самосопряженные операторы в этом пространстве.

Можно показать, что основная формула для среднего значения наблюдаемой A в состоянии ω сохраняет свой вид

$$\langle A \mid \omega \rangle = \operatorname{Tr} AM, \tag{1}$$

где M — положительный самосопряженный оператор в $\mathscr{H}$ со следом, равным единице.

Для любого самосопряженного оператора может быть построена спектральная функция $P_A(\lambda)$, т. е. семейство проекторов со следующими свойствами:

1) $P_A(\lambda) \leqslant P_A(\mu)$ при $\lambda < \mu$, т. е. $P_A(\lambda) P_A(\mu) = P_A(\lambda)$,

2) $P_A(\lambda)$ непрерывен справа, т. е. $\lim\limits_{\mu \to \lambda+0} P_A(\mu) = P_A(\lambda)$,

3) $P_A(-\infty) = \lim\limits_{\lambda \to -\infty} P_A(\lambda) = 0, \quad P_A(\infty) = I$,

4) $P_A(\lambda) B = BP_A(\lambda)$, если B — любой ограниченный оператор, коммутирующий с A.

Вектор φ принадлежит области определения оператора A ($\varphi \in D(A)$), если

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\,(P_A(\lambda)\,\varphi, \varphi) < \infty$$

и тогда

$$A\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, dP_A(\lambda)\,\varphi. \tag{2}$$

Функция от оператора $f(A)$ определяется формулой

$$f(A)\,\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\, dP_A(\lambda)\,\varphi. \tag{3}$$

Область определения этого оператора $D(f(A))$ есть множество элементов φ, для которых

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\,f(\lambda)\,|^2\, d\,(P_A(\lambda)\,\varphi, \varphi) < \infty.$$

Спектр самосопряженного оператора представляет собой замкнутое множество точек вещественной оси, состоящее из всех точек роста спектральной функции $P_A(\lambda)$. Скачки этой функции соответствуют собственным числам оператора A, а $P_A(\lambda+0) - P_A(\lambda-0)$ есть проектор на собственное подпространство, отвечающее собственному числу λ. Собственные числа образуют точечный спектр. Если собственные векторы образуют полную систему, то оператор имеет чисто точечный спектр. В общем случае пространство может быть разбито

в прямую сумму ортогональных и инвариантных относительно A подпространств $\mathscr{H}_1$ и $\mathscr{H}_2$ таких, что в первом оператор A имеет чисто точечный спектр, а во втором не имеет собственных векторов. Спектр оператора в подпространстве $\mathscr{H}_2$ называют непрерывным.

Из основной формулы (1) следует, что функция распределения наблюдаемой A в состоянии $\omega \leftrightarrow M$ в общем случае имеет вид

$$\omega_A(\lambda) = \operatorname{Tr} P_A(\lambda) M, \tag{4}$$

а для чистых состояний $M = P_\psi$, $\|\psi\| = 1$

$$\omega_A(\lambda) = (P_A(\lambda)\psi, \psi). \tag{5}$$

В отличие от конечномерной модели функция $\omega_A(\lambda)$ не обязательно является функцией скачков. Множество допустимых значений наблюдаемой A совпадает с множеством точек роста функций $\omega_A(\lambda)$ для всевозможных состояний ω. Поэтому можно утверждать, что множество возможных результатов измерения наблюдаемой A совпадает с ее спектром. Мы видим, что теория позволяет описывать наблюдаемые как с дискретным, так и непрерывным множеством значений.

Теперь наша задача — описать правила выбора пространств состояний и научиться строить основные наблюдаемые для реальных физических систем. Здесь мы будем описывать квантовые системы, имеющие классический аналог. Задача ставится следующим образом. Пусть мы имеем классическую систему, т. е. заданы ее фазовое пространство и функция Гамильтона. Нужно найти квантовую систему, т. е. построить пространство состояний и оператор Шредингера так, чтобы между классическими наблюдаемыми (функциями на фазовом пространстве) и квантовыми наблюдаемыми (операторами в пространстве состояний) было установлено взаимно-однозначное соответствие $f \leftrightarrow A_f$. При этом функции Гамильтона должен соответствовать оператор Шредингера. Это взаимно-однозначное соответствие ни в коем случае не может быть изоморфизмом $fg \not\leftrightarrow A_f \circ A_g$, $\{f, g\} \not\leftrightarrow \{A_f, A_g\}_h$ (именно поэтому квантовая механика отличается от классической), но должно становиться изоморфизмом при $h \to 0$ (что обеспечит предельный переход квантовой механики в классическую). Обычно квантовые наблюдаемые A_f имеют те же названия, что и классические f. Заметим, что мы не должны исключать возможности существования квантовых систем, не имеющих простого классического аналога. У таких систем могут быть наблюдаемые, которым не соответствует никакая функция обобщенных координат и импульсов.

В полном объеме правила соответствия и предельный переход в классическую механику будут описаны в § 14. Пока мы установим такое соответствие только между наиболее важными

наблюдаемыми и покажем, как строится пространство состояний для простейших систем.

Рассмотрим сначала материальную точку. Ее фазовое пространство шестимерно и точка в нем определяется заданием трех декартовых координат q_1, q_2, q_3 и трех проекций импульса p_1, p_2, p_3. Нетрудно сосчитать классические скобки Пуассона для любой пары из этих наблюдаемых

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{p_i, q_j\} = \delta_{i,j}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Для частицы в квантовой механике мы введем шесть наблюдаемых Q_1, Q_2, Q_3, P_1, P_2, P_3, у которых квантовые скобки Пуассона имеют те же значения

$$\{Q_i, Q_j\}_h = 0, \quad \{P_i, P_j\}_h = 0, \quad \{P_i, Q_j\}_h = I\delta_{ij}, \tag{6}$$

где I — единичный оператор. Эти наблюдаемые будем называть координатами и проекциями импульса.

В дальнейшем мы сумеем оправдать такое сопоставление операторов координатам и импульсам следующими обстоятельствами. Изучив наблюдаемые, определенные соотношениями (6), мы увидим, что они обладают многими свойствами классических координат и импульсов. Например, для свободной частицы проекции импульса являются интегралами движения, а средние значения координат линейно зависят от времени (равномерное прямолинейное движение).

Далее, соответствие $q_i \leftrightarrow Q_i$, $p_i \leftrightarrow P_i$, $i = 1, 2, 3$, явится для нас основой для построения общего соответствия $f(q, p) \leftrightarrow$ $\leftrightarrow A_f$. Определенные таким образом квантовые наблюдаемые, в том числе координаты и импульсы, при предельном переходе превращаются в соответствующие классические наблюдаемые *. Наконец, правила соответствия $f \leftrightarrow A_f$ делают теорию вполне конкретной, и ее результаты могут проверяться в экспериментах. Именно согласие теории с экспериментом следует считать окончательным оправданием предположения (6) и всей квантовой механики.

Условия (6) называются условиями квантования Гейзенберга. Из этих условий и формулы (7.1) сразу следуют соотношения неопределенности Гейзенберга для координат и импульсов. Эти соотношения мы уже обсуждали.

Часто формулы (6) записываются для коммутаторов

$$[Q_j, Q_k] = 0, \quad [P_j, P_k] = 0, \quad [Q_j, P_k] = i\hbar\delta_{jk}. \tag{7}$$

Эти соотношения называются перестановочными соотношениями Гейзенберга.

---

* Точный смысл этого утверждения обсуждается в § 14.

Имеет место замечательная теорема Неймана — Стоуна. Мы сформулируем ее без доказательства *.

У системы соотношений (7) существует единственное неприводимое представление операторами в гильбертовом пространстве (с точностью до унитарного преобразования).

Напомним, что означает неприводимость представления. Обычно используют два эквивалентных определения:

1) представление соотношений (7) называется неприводимым, если не существует оператора, отличного от кратного единичному CI и коммутирующего со всеми операторами Q_i и P_i;

2) представление называется неприводимым, если не существует в $\mathscr{H}$ подпространства $\mathscr{H}_0$, инвариантного относительно всех операторов Q_i и P_i.

Проверим эквивалентность этих определений. Если существует инвариантное относительно Q_i и P_i подпространство $\mathscr{H}_0$, то проектор на это подпространство $P_{\mathscr{H}_0}$ коммутирует с Q_i и P_i и, очевидно, $P_{\mathscr{H}_0} \neq CI$.

Если есть оператор $A \neq CI$, коммутирующий со всеми Q_i и P_i, то A^*, а значит, и $A + A^*$ коммутируют с Q_i и P_i. Поэтому с самого начала можно считать A самосопряженным. Самосопряженный оператор A имеет спектральную функцию $P_A(\lambda)$, которая при некотором λ отлична от нуля и CI. Оператор $P_A(\lambda)$ коммутирует с Q_i и P_i, и, следовательно, подпространство $\mathscr{H}_0$, на которое он проектирует, инвариантно относительно Q_i и P_i.

Из теоремы Неймана — Стоуна следует, что если мы найдем какое-либо представление перестановочных соотношений Гейзенберга и докажем его неприводимость, то все остальные неприводимые представления будут отличаться от него унитарным преобразованием.

Мы знаем, что физическое толкование теории основано на формуле для среднего значения $\langle A|\omega\rangle = \mathrm{Tr}\, AM$. Правая часть этой формулы не меняется при унитарном преобразовании всех операторов. Поэтому физические результаты теории не зависят от того, какое из унитарно эквивалентных представлений мы выбираем.

§ 11. Координатное и импульсное представления

Опишем наиболее часто используемое в квантовой механике так называемое координатное представление. Иногда его называют представлением Шредингера. В этом представлении в качестве пространства состояний для материальной точки выби-

---

* Приведенная формулировка не является точной, так как имеются тонкости, связанные с неограниченностью операторов P и Q, которые мы не обсуждаем. Подобные трудности не возникнут, если вместо самих операторов P и Q рассматривать ограниченные функции от этих операторов. Точную формулировку теоремы Неймана — Стоуна мы приведем в § 13.

рается пространство $L^2(\mathbf{R}^3)$ квадратично интегрируемых комплекснозначных функций $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(x_1, x_2, x_3)$. Скалярное произведение определяется равенством

$$(\varphi_1, \varphi_2) = \int_{\mathbf{R}^3} \varphi_1(\mathbf{x}) \overline{\varphi_2(\mathbf{x})}\, d\mathbf{x}. \tag{1}$$

Операторы Q_j и P_j, $j = 1, 2, 3$ вводятся формулами

$$Q_j\varphi(\mathbf{x}) = x_j\varphi(\mathbf{x}),$$
$$P_j\varphi(\mathbf{x}) = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\varphi(\mathbf{x}). \tag{2}$$

Это неограниченные операторы, что соответствует физическому смыслу наблюдаемых, так как численные значения координат и импульсов неограничены. На области D, образованной бесконечно дифференцируемыми функциями, убывающими быстрее любой степени, определены сами операторы Q_j и P_j и любые их целые положительные степени. Очевидно, область D плотна в $\mathcal{H}$. Можно показать, что операторы Q_j и P_j имеют единственные самосопряженные расширения по замыканию. Симметрия этих операторов проверяется просто. Например, для P_1 и любых функций $\psi \in D$, $\varphi \in D$, интегрируя по частям, имеем

$$(P_1\varphi, \psi) = \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{x}\, \frac{h}{i}\frac{\partial\varphi(\mathbf{x})}{\partial x_1}\overline{\psi(\mathbf{x})} = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \frac{h}{i}\varphi(\mathbf{x})\overline{\psi(\mathbf{x})}\Bigg|_{x_1=-\infty}^{x_1=\infty} -$$
$$- \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{x}\varphi(\mathbf{x})\frac{h}{i}\overline{\frac{\partial\psi(\mathbf{x})}{\partial x_1}} = \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{x}\varphi(\mathbf{x})\overline{\frac{h}{i}\frac{\partial\psi(\mathbf{x})}{\partial x_1}} = (\varphi, P_1\psi).$$

Проверим перестановочные соотношения (10.7). Первые два из них очевидны, а третье следует из равенств

$$P_kQ_j\varphi(\mathbf{x}) = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}(x_j\varphi(\mathbf{x})) = \frac{h}{i}\delta_{jk}\varphi(\mathbf{x}) + x_j\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}\varphi(\mathbf{x}),$$
$$Q_jP_k\varphi(\mathbf{x}) = x_j\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}\varphi(\mathbf{x}).$$

Таким образом, мы действительно построили представление соотношений (10.7) линейными операторами. Неприводимость этого представления мы докажем позже.

Приведем еще один пример представления (импульсное представление). В этом представлении пространство состояний $\mathcal{H}$ тоже является комплексным пространством $L^2(\mathbf{R}^3)$ с элементами $\varphi(\mathbf{p})$, а операторы Q_j и P_j, $j = 1, 2, 3$ определяются следующим образом:

$$Q_j\varphi(\mathbf{p}) = ih\frac{\partial}{\partial p_j}\varphi(\mathbf{p}),$$
$$P_j\varphi(\mathbf{p}) = p_j\varphi(\mathbf{p}). \tag{3}$$

Перестановочные соотношения (10.7) проверяются так же, как для координатного представления, и так же доказывается неприводимость. По теореме Неймана — Стоуна эти представления унитарно эквивалентны, т. е. должно существовать унитарное преобразование *

$$\varphi(\mathbf{x}) \xrightarrow{W} \varphi(\mathbf{p}),$$

при котором операторы, определенные формулами (3), превращаются в операторы (2). Нетрудно видеть, что таким преобразованием является преобразование Фурье

$$\varphi(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} e^{\frac{i}{h}\mathbf{px}} \varphi(\mathbf{p})\, d\mathbf{p}, \tag{4}$$

$$\varphi(\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} e^{-\frac{i}{h}\mathbf{px}} \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \tag{5}$$

Унитарность преобразования Фурье следует из равенства Парсеваля

$$\int\limits_{\mathbf{R}^3} |\varphi(\mathbf{x})|^2 dx = \int\limits_{\mathbf{R}^3} |\varphi(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}.$$

Применяя оператор $\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$ к выражению (4), получим

$$\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} e^{\frac{i}{h}\mathbf{px}} \varphi(\mathbf{p})\, d\mathbf{p} = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} e^{\frac{i}{h}\mathbf{px}} p_j \varphi(\mathbf{p})\, d\mathbf{p}.$$

Мы видим, что при унитарном преобразовании W оператор $\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}$ превращается в оператор умножения на переменную p_j. Аналогично проверяется, что

$$x_j \varphi(x) \xrightarrow{W} ih \frac{\partial}{\partial p_j} \varphi(\mathbf{p}).$$

Таким образом, мы проверили унитарную эквивалентность координатного и импульсного представлений.

Выпишем формулы преобразования интегральных операторов при переходе от координатного к импульсному представ-

---

* Мы сознательно используем один и тот же символ для обозначения разных функций $\varphi(\mathbf{x})$ и $\varphi(\mathbf{p})$, так как обе эти функции представляют один и тот же вектор состояния φ.

лению:

$$A\varphi(\mathbf{x}) = \int\limits_{\mathbf{R}^3} A(\mathbf{x}, \mathbf{y})\,\varphi(\mathbf{y})\,d\mathbf{y},$$

$$A\varphi(\mathbf{p}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} e^{-\frac{i}{h}\mathbf{px}} A\varphi(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} =$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{3} \int\limits_{R^9} e^{-\frac{i}{h}\mathbf{px}} A(\mathbf{x}, \mathbf{y})\, e^{\frac{i}{h}\mathbf{qy}} \varphi(\mathbf{q})\,d\mathbf{x}\,d\mathbf{y}\,d\mathbf{q} =$$

$$= \int\limits_{R^3} A(\mathbf{p}, \mathbf{q})\,\varphi(\mathbf{q})\,d\mathbf{q},$$

где
$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{3} \int\limits_{R^6} e^{-\frac{i}{h}\mathbf{px}} A(\mathbf{x}, \mathbf{y})\, e^{\frac{i}{h}\mathbf{qy}}\,d\mathbf{x}\,d\mathbf{y}. \tag{6}$$

Если оператор в координатном представлении является оператором умножения на функцию $f(\mathbf{x})$, то его можно рассматривать как интегральный с ядром

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f(\mathbf{x})\,\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}).$$

В импульсном представлении ядро такого оператора зависит только от разности переменных и имеет вид

$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{3} \int\limits_{R^3} f(\mathbf{x})\, e^{\frac{i}{h}\mathbf{x}(\mathbf{q}-\mathbf{p})}\,d\mathbf{x}. \tag{7}$$

Формулы преобразования от импульсного представления к координатному отличаются знаком в показателях экспонент

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{3} \int\limits_{R^6} e^{\frac{i}{h}\mathbf{px}} A(\mathbf{p}, \mathbf{q})\, e^{-\frac{i}{h}\mathbf{qy}}\,d\mathbf{p}\,d\mathbf{q}, \tag{8}$$

и если
$$A(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = F(\mathbf{p})\,\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}), \text{ то}$$

$$A(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{3} \int\limits_{R^3} F(\mathbf{p})\, e^{\frac{i}{h}\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\,d\mathbf{p}. \tag{9}$$

Выясним теперь физический смысл функций $\varphi(\mathbf{x})$ и $\varphi(\mathbf{p})$, которые обычно называют волновыми функциями. Начнем с волновой функции в координатном представлении $\varphi(\mathbf{x})$. В этом представлении операторы Q_i $(i = 1, 2, 3)$ есть операторы умножения на переменные x_i, т. е. координатное представление является собственным для операторов Q_i. Чтобы пояснить это, сделаем небольшое математическое отступление.

Задать функциональное представление гильбертова пространства $\mathscr{H}$ — это значит задать взаимно-однозначное соответствие между векторами этого пространства и функциями веще-

ственной переменной $\varphi \longleftrightarrow \varphi(x)$ и задать меру на вещественной оси $dm(x)$ так, что

$$(\varphi, \psi) = \int_R \varphi(x) \overline{\psi(x)}\, dm(x).$$

Значения функции $\varphi(x)$ могут быть комплексными числами или функциями от других переменных, т. е. являться элементами какого-то дополнительного пространства, и $\varphi(x)\overline{\psi(x)}$ тогда обозначает скалярное произведение в этом дополнительном пространстве. В первом случае представление называется простым, а во втором — кратным. Две функции $\varphi(x)$ следует считать равными, если они отличаются только на множестве m-меры нуль.

Представление называется спектральным для оператора A, если действие этого оператора сводится к умножению на некоторую функцию $f(x)$

$$A\varphi \longleftrightarrow f(x)\, \varphi(x).$$

Представление называется прямым или собственным для оператора A, если $f(x) = x$,

$$A\varphi \longleftrightarrow x\varphi(x).$$

Спектр оператора A может быть описан как носитель функции распределения меры. Скачки меры соответствуют собственным числам. Если мера абсолютно непрерывна, то спектр непрерывный.

Напомним, что в конечномерном пространстве $\mathbf{C}^n$ мы называли собственным для оператора A такое представление, в котором векторы φ задавались коэффициентами разложения φ_i по собственному базису оператора A. Пусть спектр оператора A простой

$$A\psi_i = a_i\psi_i,$$

$$\varphi = \sum_{i=1}^{n} \varphi_i\psi_i, \quad \varphi_i = (\varphi, \psi_i).$$

Вектору φ можно сопоставить функцию $\varphi(x)$, такую, что $\varphi(a_i) = \varphi_i$ (значения функции $\varphi(x)$ при $x \neq a_i$ выбираются произвольно). Функцию распределения меры выберем кусочно-постоянной с единичными скачками при $x = a_i$. Оператор A тогда можно задать формулой

$$A\varphi \longleftrightarrow x\varphi(x),$$

так как эта запись эквивалентна обычной

$$A \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \varphi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1\varphi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n\varphi_n \end{pmatrix}.$$

Кратному собственному значению a_i соответствует несколько собственных векторов. Мы можем ввести функцию $\varphi(x)$, значение которой в точке a_i есть вектор с компонентами φ_{ik}, $k = 1, 2, \ldots, r_i$. В этом случае представление будет кратным, и кратность его равна кратности r_i собственного числа a_i.

Мы видим, что оператор в собственном представлении является аналогом диагональной матрицы в $\mathbf{C}^n$.

В собственном представлении оператора A легко описать функцию $f(A)$

$$f(A)\varphi \leftrightarrow f(x)\varphi(x). \tag{10}$$

В частности, для спектральной функции оператора $P_A(\lambda) = \theta(\lambda - A)$ формула (10) дает

$$P_A(\lambda)\varphi \leftrightarrow \theta(\lambda - x)\varphi(x) = \begin{cases} \varphi(x), & x \leqslant \lambda, \\ 0, & x > \lambda. \end{cases}$$

Спектр оператора A будет полностью описан, если для оператора A удастся построить его спектральное представление. Преобразование, которое переводит даннóе представление в спектральное, называется спектральным преобразованием.

Вернемся к координатному представлению. Мы видим, что оно действительно является собственным кратным представлением для трех операторов Q_1, Q_2, Q_3:

$$Q_1\varphi \leftrightarrow x_1\varphi(x_1).$$

Значение $\varphi(x_1)$ есть вектор дополнительного пространства, в данном случае функция от переменных x_2 и x_3. Скалярное произведение определяется формулой

$$(\varphi, \psi) = \int_R \varphi(x_1)\overline{\psi(x_1)}\,dx_1,$$

т. е. в координатном представлении мера $m(x)$ есть лебегова мера, носитель ее функции распределения — вся вещественная ось, а значит, спектр координаты непрерывный и заполняет всю ось.

Функция распределения координаты Q_1 в чистом состоянии $\omega \leftrightarrow P_\varphi$ имеет вид

$$\omega_{Q_1}(\lambda) = (P_{Q_1}(\lambda)\varphi, \varphi) = \int_{-\infty}^{\lambda} \varphi(x_1)\overline{\varphi(x_1)}\,dx_1,$$

откуда следует, что

$$\varphi(x_1)\overline{\varphi(x_1)} = \int_{R^2} \varphi(x_1, x_2, x_3)\overline{\varphi(x_1, x_2, x_3)}\,dx_2\,dx_3$$

есть плотность функции распределения координаты Q_1. Аналогично записываются выражения для плотности функций распределения Q_2 и Q_3. Естественно ожидать, что $|\varphi(x)|^2$ есть

плотность общей для всех координат функции распределения, т. е. вероятность найти частицу в области Ω трехмерного пространства определяется выражением $\int\limits_{\Omega} |\varphi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$. Это утверждение мы проверим в разделе, посвященном системам коммутирующих наблюдаемых.

Импульсное представление является собственным для трех операторов P_1, P_2, P_3, и $|\varphi(\mathbf{p})|^2$ есть плотность общей для трех проекций импульса функции распределения.

Мы можем теперь с новой точки зрения взглянуть на соотношения неопределенности для координат и импульсов. Мы видим, что эти соотношения объясняются известным свойством преобразования Фурье. Чем сильнее концентрируется функция $\varphi(\mathbf{x})$ и тем самым уменьшаются неопределенности координат $\Delta_\omega Q_i$, тем сильнее расплывается Фурье-образ $\varphi(\mathbf{p})$ и увеличиваются неопределенности импульсов $\Delta_\omega P_i$.

§ 12. «Собственные функции» операторов Q и P

Рассмотрим теперь уравнения для собственных векторов операторов Q и P. Для простоты записи рассмотрим частицу с одной степенью свободы. В координатном представлении эти уравнения имеют вид

$$x\varphi_{x_0}(x) = x_0\varphi_{x_0}(x), \tag{1}$$

$$\frac{h}{i}\frac{d}{dx}\varphi_p(x) = p\varphi_p(x). \tag{2}$$

Решая эти уравнения, получим

$$\varphi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0), \tag{3}$$

$$\varphi_p(x) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{h}px}. \tag{4}$$

(Первая формула сразу следует из свойства δ-функции $x\delta(x) = 0$, вторая очевидна. Выбор нормировочных констант будет ясен из дальнейшего.)

Хотя «собственная функция» оператора координаты $\varphi_{x_0}(x)$ есть обобщенная функция, а $\varphi_p(x)$ — обычная функция, их объединяет то, что они обе не являются квадратично интегрируемыми, т. е. не принадлежат пространству L^2. Собственных функций в обычном смысле слова у операторов Q и P нет.

Чтобы понять, как функции $\varphi_x(x)$ и $\varphi_p(x)$ связаны со спектром операторов Q и P, вспомним, какой смысл имеют собственные векторы в $\mathbf{C}^n$. Задача о нахождении собственных чисел и собственных векоторов матрицы A связана с задачей о диагонализации этой матрицы подобным преобразованием или, иначе говоря, с преобразованием оператора из некоторого ис-

ходного представления в собственное. Для самосопряженного оператора A в $\mathbf{C}^n$ всегда существует базис, составленный из собственных векторов

$$A\varphi_i = a_i\varphi_i, \quad (\varphi_i, \varphi_k) = \delta_{ik}.$$

Собственные векторы мы ищем в исходном представлении, в котором

$$\xi \longleftrightarrow (\xi_1, \ldots, \xi_n),$$
$$\varphi_i \longleftrightarrow \left(\varphi_1^{(i)}, \ldots, \varphi_n^{(i)}\right).$$

Компоненты вектора ξ в собственном представлении оператора A вычисляются по формуле

$$\xi_i' = (\xi, \varphi_i) = \sum_{k=1}^{n} \xi_k \overline{\varphi_k^{(i)}}. \tag{5}$$

Мы видим, что матрица, составленная из чисел, сопряженных компонентам собственных векторов $U_{ik} = \overline{\varphi_k^{(i)}}$, осуществляет спектральное преобразование

$$\xi_i' = \sum_{k=1}^{n} U_{ik}\xi_k.$$

Матрица U является унитарной, так как

$$\sum_{k=1}^{n} U_{ik}U_{kj}^* = \sum_{k=1}^{n} U_{ik}\overline{U_{jk}} = \sum_{k=1}^{n} \overline{\varphi_k^{(i)}}\varphi_k^{(j)} = (\varphi_j, \varphi_i) = \delta_{ij}.$$

Если мы формально в (5) заменим φ_i на φ_p и ξ_i' на $\xi(p)$, то получим

$$\xi(p) = (\xi, \varphi_p)$$

или

$$\xi(p) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ipx}{h}} \xi(x)\, dx. \tag{6}$$

Эта формула нам уже знакома. Мы видим, что функция $U(p, x) = \overline{\varphi_p(x)}$ является ядром унитарного оператора, переводящего координатное представление в импульсное (собственное для оператора P). Так же может быть истолкована и «собственная функция» оператора координаты Q. Координатное представление является собственным для оператора Q, поэтому оператор, осуществляющий спектральное преобразование, должен быть единичным, а $\overline{\varphi_{x_0}(x)} = \delta(x - x_0)$ является ядром единичного оператора.

На этих примерах мы видим, что «собственные функции» непрерывного спектра, хотя и не являются собственными элементами в обычном смысле слова, но их связь со спектральным преобразованием остается такой же, как и для собственных векторов в конечномерном пространстве.

Заметим, что существует конструкция, позволяющая придать решениям уравнения

$$A\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$$

точный смысл собственных векторов даже для случая, когда φ_λ не принадлежат $\mathscr{H}$. Для этого вводится более широкое пространство $\Phi^* \supset \mathscr{H}$, элементами которого являются линейные функционалы, определенные на некотором пространстве $\Phi \subset \mathscr{H}$. Пару пространств Φ и Φ^* удается построить так, чтобы каждый самосопряженный оператор в $\mathscr{H}$ имел в Φ^* полную систему собственных векторов. Собственные элементы оператора A, принадлежащие Φ^* и не принадлежащие $\mathscr{H}$, называются обобщенными собственными элементами. Если оператор A имеет простой спектр, то для любого $\psi \in \Phi$ имеет место разложение по собственным элементам

$$\psi = \int_{\mathbf{R}} c(\lambda)\,\varphi_\lambda\,d\lambda. \tag{7}$$

Преобразование Фурье может быть истолковано как разложение по собственным функциям оператора импульса $\varphi_p(x)$:

$$\varphi(x) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{\mathbf{R}} \varphi(p)\, e^{i\frac{px}{h}}\,dp. \tag{8}$$

Нормировочная константа $(1/2\pi h)^{1/2}$ в выражении для собственной функции импульса соответствует условию нормировки

$$\int_{\mathbf{R}} \varphi_p(x)\,\overline{\varphi_{p'}(x)}\,dx = \delta(p - p'). \tag{9}$$

Эта формула — следствие известного интегрального представления для δ-функции:

$$\int_{\mathbf{R}} e^{ikx}\,dx = 2\pi\delta(k). \tag{10}$$

В двух последних формулах интегралы понимаются в смысле главного значения. Формула (9) есть аналог равенства

$$(\varphi_i, \varphi_k) = \delta_{ik}$$

для собственных векторов дискретного спектра.

Построим теперь спектральную функцию оператора импульса. Только в этом месте мы используем для спектральной функции букву Π, чтобы не путать ее с оператором импульса.

В импульсном представлении оператор $\Pi_p(\lambda)$ есть оператор умножения на функцию

$$\Pi_p(\lambda)\,\varphi(p) = \theta(\lambda - p)\,\varphi(p).$$

Перейдем к координатному представлению. Используя формулу (11.9) для одномерного случая, получим

$$\Pi_p(\lambda)(x, y) = \frac{1}{2\pi h}\int\limits_R \theta(\lambda - p)\, e^{\frac{i}{h}p(x-y)}\, dp =$$

$$= \frac{1}{2\pi h}\int\limits_{-\infty}^{\lambda} e^{\frac{i}{h}p(x-y)}\, dp = \int\limits_{-\infty}^{\lambda} \varphi_p(x)\overline{\varphi_p(y)}\, dp.$$

Производная от спектральной функции по параметру λ называется спектральной плотностью. Ядро этого оператора имеет вид

$$\frac{d}{d\lambda}\Pi_p(\lambda)(x, y) = \varphi_\lambda(x)\overline{\varphi_\lambda(y)} = \frac{1}{2\pi h} e^{\frac{i}{h}\lambda(x-y)}.$$

Мы видим, что это аналог проектора на одномерное собственное подпространство.

§ 13. Энергия, момент импульса и другие примеры наблюдаемых

Перейдем теперь к изучению более сложных наблюдаемых. Наша задача сопоставить произвольной классической наблюдаемой $f(p, q)$ ее квантовый аналог A_f. Хотелось бы положить $A_f = f(P, Q)$ но не существует общего определения функции от некоммутирующих операторов. Например, уже не понятно, какой из операторов Q^2P, QPQ или PQ^2 следует сопоставить классической наблюдаемой q^2p. Однако для наиболее важных наблюдаемых указанных трудностей вообще не возникает, так как эти наблюдаемые являются суммами функций от коммутирующих между собой компонент Q_1, Q_2, Q_3 и P_1, P_2, P_3.

Приведем некоторые примеры.

Кинетическая энергия частицы в классической механике

$$T = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m}.$$

Соответствующий оператор кинетической энергии имеет вид

$$T = \frac{P_1^2 + P_2^2 + P_3^2}{2m}$$

и в координатном представлении

$$T\varphi(\mathbf{x}) = -\frac{h^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{x}), \tag{1}$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$ — оператор Лапласа. В импульсном представлении оператор T есть оператор умножения на функцию

$$T\varphi(\mathbf{p}) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m}\varphi(\mathbf{p}).$$

Точно так же легко ввести оператор потенциальной энергии $V(Q_1, Q_2, Q_3)$. В координатном представлении V является оператором умножения на функцию

$$V\varphi(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}), \tag{2}$$

а в импульсном — интегральным оператором с ядром

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \left(\frac{1}{2\pi h}\right)^3 \int\limits_{\mathbf{R}^3} V(\mathbf{x})\, e^{\frac{i}{h}\mathbf{x}(\mathbf{q}-\mathbf{p})}\, d\mathbf{x}.$$

Оператор полной энергии (оператор Шредингера) определяется равенством

$$H = T + V.$$

Запишем подробно уравнение Шредингера

$$ih\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t). \tag{3}$$

В координатном представлении уравнение Шредингера для частицы является дифференциальным уравнением в частных производных

$$ih\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, t), \tag{4}$$

а в импульсном — интегродифференциальным

$$ih\frac{\partial\psi(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{p}, t) + \int\limits_{\mathbf{R}^3} V(\mathbf{p}, \mathbf{q})\psi(\mathbf{q}, t)\, d\mathbf{q}.$$

Рассмотрим наряду с (4) уравнение для комплексно-сопряженной волновой функции

$$-ih\frac{\partial\overline{\psi(\mathbf{x}, t)}}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\Delta\overline{\psi(\mathbf{x}, t)} + V(\mathbf{x})\overline{\psi(\mathbf{x}, t)}. \tag{5}$$

Умножая уравнение (4) на $\bar{\psi}$, уравнение (5) на ψ и вычитая одно из другого, получим

$$ih\left(\bar{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\bar{\psi}}{\partial t}\right) =$$

$$= -\frac{h^2}{2m}(\bar{\psi}\,\Delta\psi - \psi\,\Delta\bar{\psi}) = -\frac{h^2}{2m}\operatorname{div}(\bar{\psi}\operatorname{grad}\psi - \psi\operatorname{grad}\bar{\psi})$$

или

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0, \tag{6}$$

где

$$\mathbf{j} = \frac{ih}{2m}(\psi\operatorname{grad}\bar{\psi} - \bar{\psi}\operatorname{grad}\psi).$$

Уравнение (6) является уравнением неразрывности и выражает закон сохранения вероятности. Вектор $\mathbf{j}$ называется вектором плотности потока вероятности. Из уравнения (6) видно, что вектор $\mathbf{j}$ имеет следующий смысл: $\int\limits_S j_n\,dS$ есть вероятность того, что частица пересечет поверхность S за единицу времени.

Важную роль и в классической, и в квантовой механиках играет момент импульса. Эта наблюдаемая в классической механике является вектором, проекции которого в декартовой системе координат имеют вид

$$l_1 = q_2p_3 - q_3p_2,$$
$$l_2 = q_3p_1 - q_1p_3,$$
$$l_3 = q_1p_2 - q_2p_1.$$

В квантовой механике проекциями момента импульса являются операторы

$$L_k = Q_lP_m - Q_mP_l. \tag{7}$$

Здесь k, l, m — циклическая перестановка значков 1, 2, 3. В правую часть (7) входят произведения только разноименных координаты и проекции импульса, т. е. произведения коммутирующих операторов. Интересно заметить, что операторы L_k имеют одинаковый вид в импульсном и координатном представлении

$$\begin{aligned} L_k\varphi(\mathbf{x}) &= \frac{h}{i}\left(x_l\frac{\partial}{\partial x_m} - x_m\frac{\partial}{\partial x_l}\right)\varphi(\mathbf{x}),\\ L_k\varphi(\mathbf{p}) &= \frac{h}{i}\left(p_l\frac{\partial}{\partial p_m} - p_m\frac{\partial}{\partial p_l}\right)\varphi(\mathbf{p}). \end{aligned} \tag{8}$$

Свойства операторов L_k будут подробно изучены ниже.

Квантовая механика описывает, конечно, и более сложные, чем материальная точка, системы. Так, для системы из N материальных точек пространством состояний в координатном представлении является пространство* $L^2(\mathbf{R}^{3N})$ функций от N векторных переменных $\varphi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)$. Оператор Шредингера для такой системы (аналог функций Гамильтона (1.5)) имеет вид

$$H = -\sum_{i=1}^{N}\frac{h^2}{2m_i}\Delta_i + \sum_{i<j}^{N} V_{ij}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^{N} V_i(\mathbf{x}_i). \tag{9}$$

Физический смысл слагаемых здесь тот же, что и в классической механике.

---

* В дальнейшем мы увидим, что для тождественных частиц пространство состояний $\mathcal{H}$ совпадает с подпространством $L_S^2 \subset L^2$ функций с определенной симметрией.

Рассмотрим еще два оператора для материальной точки, которые окажутся полезными при обсуждении взаимосвязи квантовой и классической механики

$$U(\mathbf{u}) = e^{-i(u_1P_1+u_2P_2+u_3P_3)}, \tag{10}$$

$$V(\mathbf{v}) = e^{-i(v_1Q_1+v_2Q_2+v_3Q_3)}, \tag{11}$$

где $\mathbf{u}(u_1, u_2, u_3)$ и $\mathbf{v}(v_1, v_2, v_3)$ — вещественные параметры. Оператор $V(\mathbf{v})$ в координатном представлении является оператором умножения на функцию

$$V(\mathbf{v})\,\varphi(\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{vx}}\varphi(\mathbf{x}).$$

Выясним теперь смысл оператора $U(\mathbf{u})$. Для простоты рассмотрим одномерный случай

$$U(u) = e^{-iuP}.$$

Обозначим $\varphi(u, x) = e^{-iuP}\varphi(x)$. Дифференцируя $\varphi(u, x)$ по параметру u, имеем

$$\frac{\partial\varphi(u, x)}{\partial u} = -iP\varphi(u, x),$$

или

$$\frac{\partial\varphi(u, x)}{\partial u} = -h\frac{\partial\varphi(u, x)}{\partial x}.$$

Чтобы найти функцию $\varphi(u, x)$, нужно решить это уравнение с начальным условием

$$\varphi(u, x)\,|_{u=0} = \varphi(x).$$

Единственное решение, очевидно, имеет вид

$$\varphi(u, x) = \varphi(x - hu).$$

Мы видим, что оператор $U(u)$ в координатном представлении есть оператор сдвига аргумента функции $\varphi(x)$ на величину $-hu$. В трехмерном случае

$$U(\mathbf{u})\,\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{u}h). \tag{12}$$

Операторы $U(\mathbf{u})$ и $V(\mathbf{v})$ являются унитарными вследствие самосопряженности операторов P_1, P_2, P_3 и Q_1, Q_2, Q_3. Найдем перестановочные соотношения для операторов $U(\mathbf{u})$ и $V(\mathbf{v})$. В координатном представлении имеем

$$V(\mathbf{v})\,U(\mathbf{u})\,\varphi(\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{vx}}\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{u}h),$$

$$U(\mathbf{u})\,V(\mathbf{v})\,\varphi(\mathbf{x}) = e^{-i\mathbf{v}(\mathbf{x}-\mathbf{u}h)}\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{u}h).$$

Из этих равенств сразу следует, что

$$U(\mathbf{u})\,V(\mathbf{v}) = V(\mathbf{v})\,U(\mathbf{u})\,e^{i\mathbf{vu}h}. \tag{13}$$

Разумеется, соотношения (13) не зависят от представления. Отметим еще формулы

$$U(\mathbf{u}_1)\, U(\mathbf{u}_2) = U(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2),$$
$$V(\mathbf{v}_1)\, V(\mathbf{v}_2) = V(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2),$$

т. е. множества операторов $U(\mathbf{u})$ и $V(\mathbf{v})$ образуют группы. Обозначим эти группы через U и V.

Теперь мы можем дать точную формулировку теоремы фон Неймана. Ограничимся для простоты системой с одной степенью свободы.

Теорема. Пусть U и V — однопараметрические группы унитарных операторов $U(u)$ и $V(v)$, действующих в гильбертовом пространстве $\mathscr{H}$ и удовлетворяющих условию:

$$U(u)\, V(v) = V(v)\, U(u)\, e^{ivuh}. \tag{14}$$

Тогда $\mathscr{H}$ можно представить в виде прямой суммы

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \oplus \mathscr{H}_2 \oplus \ldots, \tag{15}$$

где каждое $\mathscr{H}_l$ переводится в себя всеми операторами $U(u)$ и $V(v)$ и каждое $\mathscr{H}_l$ можно отобразить унитарно на $L^2(\mathbf{R})$ таким образом, что операторы $V(v)$ переходят в операторы $\psi(x) \to e^{-ivx}\psi(x)$, а операторы $U(u)$ переходят в операторы $\psi(x) \to \psi(x - uh)$.

Можно говорить о том, что в пространстве $\mathscr{H}$ действует представление соотношений (14) унитарными операторами. Если это представление неприводимо, то сумма (15) содержит только одно слагаемое.

В заключение этого параграфа докажем неприводимость координатного представления для P и Q.

Пусть K — некоторый оператор, коммутирующий с Q и P

$$[K, Q] = 0, \quad [K, P] = 0.$$

Из второго равенства следует, что

$$KU(u) = U(u)\, K.$$

Применяя операторы в обеих частях равенства к произвольной функции $\varphi(x)$, получим

$$\int_{\mathbf{R}} K(x, y)\, \varphi(y - uh)\, dy = \int_{\mathbf{R}} K(x - uh, y)\, \varphi(y)\, dy.$$

Замена $y - uh \to y$ в левой части позволяет переписать это равенство в виде

$$\int_{\mathbf{R}} K(x, y + uh)\, \varphi(y)\, dy = \int_{\mathbf{R}} K(x - uh, y)\, \varphi(y)\, dy.$$

В силу произвольности φ

$$K(x, y + uh) = K(x - uh, y),$$

откуда видно, что ядро $K(x, y)$ зависит только от разности $x-y$, т. е.

$$K(x, y) = k(x-y).$$

Теперь используем перестановочность оператора K с оператором координаты

$$\int_{-\infty}^{\infty} xk(x-y)\varphi(y)\,dy = \int_{-\infty}^{\infty} k(x-y)\,y\varphi(y)\,dy,$$

откуда следует, что

$$(x-y)\,k(x-y) = 0.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$k(x-y) = c\delta(x-y),$$

а функция, стоящая в правой части, есть ядро оператора CI.

Итак, мы показали, что любой оператор, коммутирующий с Q и P, кратен единичному.

§ 14. Взаимосвязь квантовой и классической механики. Предельный переход от кванговой механики к классической

Известно, что поведение макроскопических систем хорошо описывается классической механикой, и квантовая механика при переходе к макрообъектам должна приводить к тем же результатам. Критерием «квантовости» поведения системы может являться сравнительная величина характерных для системы численных значений наблюдаемых, имеющих размерность действия, и постоянной Планка $\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-27}$ эрг·с. Если постоянная Планка пренебрежимо мала по сравнению со значениями таких наблюдаемых, то система должна иметь классическое поведение. Формально переход от квантовой механики к классической может быть описан, как предельный переход при* $h \to 0$. Разумеется, при таком предельном переходе способы описания механических систем остаются различными (операторы в гильбертовом пространстве не могут превращаться в функции на фазовом пространстве), но физические результаты квантовой механики при $h \to 0$ должны совпадать с классическими.

Мы опять рассмотрим систему с одной степенью свободы. Изложение будет вестись по следующему плану.

---

* Здесь есть аналогия со связью между релятивистской и классической механиками. Релятивистскими эффектами можно пренебречь, если характерные для системы скорости v много меньше скорости света c. Формально переход от релятивистской механики к классической можно рассматривать как предельный переход при $c \to \infty$.

Сначала вещественным функциям на фазовом пространстве $f(p, q)$ мы сопоставим по некоторому правилу самосопряженные операторы A_f, $(f \to A_f)$.

Далее мы найдем формулу обращения, позволяющую по оператору A_f восстановить функцию $f(p, q)$, $(A_f \to f)$. Тем самым будет установлено взаимно-однозначное соответствие между вещественными функциями на фазовом пространстве и самосопряженными операторами в $\mathscr{H}$, $(f \longleftrightarrow A_f)$. При этом справедливой оказывается формула

$$\operatorname{Tr} A_f = \int_{\mathscr{M}} f(p, q) \frac{dp\, dq}{2\pi h}. \tag{1}$$

Наконец, мы найдем, какие функции на фазовом пространстве соответствуют произведению $A_f \circ A_g$ и квантовой скобке Пуассона $\{A_f, A_g\}$. Мы увидим, что эти функции не совпадают с произведением fg и классической скобкой Пуассона $\{f, g\}$, но в пределе при $h \to 0$ стремятся к ним. Таким образом мы убедимся, что алгебра наблюдаемых квантовой механики неизоморфна алгебре наблюдаемых классической механики, но при $h \to 0$ взаимно-однозначное соответствие $f \longleftrightarrow A_f$ становится изоморфизмом.

Пусть квантовая система с оператором Шредингера H находится в состоянии M, и пусть A_f — некоторая наблюдаемая для этой системы. Описанное взаимно-однозначное соответствие позволяет сопоставить операторам H, M и A_f функцию Гамильтона $H(p, q)$, функцию $\rho_1(p, q)$ и наблюдаемую $f(p, q)$. Введем $\rho(p, q) = \rho_1(p, q)/2\pi h$. Из формулы (1) следует, что

$$\operatorname{Tr} M = \int_{\mathscr{M}} \rho(p, q)\, dp\, dq = 1, \tag{2}$$

$$\operatorname{Tr} MA_f \xrightarrow[h \to 0]{} \int_{\mathscr{M}} f(p, q) \rho(p, q)\, dp\, dq. \tag{3}$$

Формула (2) показывает, что функция $\rho(p, q)$ имеет правильную нормировку, а формула (3) утверждает, что в пределе при $h \to 0$ среднее значение наблюдаемой в квантовой механике совпадает со средним значением соответствующей классической наблюдаемой *. Далее пусть эволюция квантовой системы описывается картиной Гейзенберга и соответствие $A_f(t) \longleftrightarrow f(t)$ установлено для произвольного момента времени t.

* Еще раз подчеркнем, что левая часть в (3) не совпадает с правой при $h \neq 0$, так как произведению MA_f соответствует функция, отличная от $f(p, q)\rho_1(p, q)$. Кроме того, заметим, что функция $\rho(p, q)$ при $h \neq 0$ может быть не положительной, т. е. не соответствовать классическому состоянию, но в пределе при $h \to 0$ из (3) следует, что $\rho(p, q)$ удовлетворяет всем требованиям к классической функции распределения.

Покажем, что при $h \to 0$ классическая наблюдаемая $f(t)$ правильно зависит от времени. Оператор $A_f(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{dA_f(t)}{dt} = \{H, A_f(t)\}_h. \tag{4}$$

Из линейности соответствия $f \leftrightarrow A_f$ следует, что $\frac{df}{dt} \leftrightarrow \frac{dA_f}{dt}$, кроме того, при $h \to 0$ $\{H, A_f\}_h \leftrightarrow \{H, f\}$, поэтому при $h \to 0$ классическое уравнение

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\}$$

является следствием квантового уравнения (4).

Перейдем к подробному изложению. Рассмотрим некоторую функцию $f(p, q)$ и обозначим через $\hat{f}(u, v)$ ее преобразование Фурье *:

$$f(q, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{R^2} \hat{f}(u, v)\, e^{-iqv} e^{-ipu}\, du\, dv, \tag{5}$$

$$\hat{f}(u, v) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{R}^2} f(q, p)\, e^{iqv} e^{ipu}\, dq\, dp. \tag{6}$$

Преобразование Фурье вещественной функции $f(p, q)$ обладает свойством

$$\overline{\hat{f}(u, v)} = \hat{f}(-u, -v). \tag{7}$$

Для построения оператора A_f, соответствующего функции $f(p, q)$, хотелось бы заменить переменные q и p в (5) на операторы Q и P. Сразу, однако, неясно, в каком порядке следует писать некоммутирующие множители $V(v)$ и $U(u)$, перестановочные соотношения для которых имеют вид

$$U(u)\, V(v) = V(v)\, U(u)\, e^{ihuv}. \tag{8}$$

Естественный (но отнюдь не единственный) рецепт, обеспечивающий самосопряженность, был предложен Г. Вейлем и имеет вид

$$A_f = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{R}^2} \hat{f}(u, v)\, V(v)\, U(u)\, e^{\frac{ihuv}{2}}\, du\, dv. \tag{9}$$

Появление дополнительного множителя $e^{\frac{ihuv}{2}}$ связано с некоммутативностью $V(v)$ и $U(u)$ и обеспечивает самосопряженность

---

* Мы опускаем те оговорки, которые следовало бы сделать, чтобы все дальнейшие преобразования стали вполне строгими.

оператора A_f. Действительно, используя (7) и (8), имеем *

$$A_f^* = \frac{1}{2\pi} \int \overline{\hat{f}(u, v)}\, U^*(u)\, V^*(v)\, e^{-\frac{ihuv}{2}}\, du\, dv =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int \hat{f}(-u, -v)\, U(-u)\, V(-v)\, e^{-\frac{ihuv}{2}}\, du\, dv =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int \hat{f}(u, v)\, U(u)\, V(v)\, e^{-\frac{ihuv}{2}}\, du\, dv =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int \hat{f}(u, v)\, V(v)\, U(u)\, e^{\frac{ihuv}{2}}\, du\, dv = A_f.$$

В конце этого параграфа мы проверим, что по формуле (9) функциям $f(q)$ и $f(p)$ соответствуют операторы $f(Q)$ и $f(P)$ в полном согласии со сделанными прежде предположениями.

Найдем теперь формулу обращения. При вычислении следа оператора K мы будем пользоваться формулой

$$\operatorname{Tr} K = \int K(x, x)\, dx, \tag{10}$$

где $K(x, y)$ — ядро оператора K. Найдем ядро оператора $V(v)\,U(u)$. Из формулы

$$V(v)\, U(u)\, \varphi(x) = e^{-ivx} \varphi(x - uh)$$

следует, что ядром интегрального оператора $V(v)\,U(u)$ является функция

$$V(v)\, U(u)\, (x, x') = e^{-ivx} \delta(x - uh - x').$$

По формуле (10) имеем

$$\operatorname{Tr} V(v)\, U(u) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ivx} \delta(-uh)\, dx = \frac{2\pi}{h}\, \delta(v)\, \delta(u). \tag{11}$$

Проверим, что формула обращения имеет вид

$$\hat{f}(u, v) = h \operatorname{Tr} A_f\, V(-v)\, U(-u)\, e^{\frac{ihuv}{2}}. \tag{12}$$

Для этого сосчитаем правую часть равенства, используя (8) и (11),

$$\operatorname{Tr} A_f V(-v)\, U(-u)\, e^{\frac{ihuv}{2}} =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \operatorname{Tr} \int \hat{f}(u', v')\, V(v')\, U(u')\, e^{\frac{ihu'v'}{2}}\, V(-v)\, U(-u)\, e^{\frac{ihuv}{2}}\, du'\, dv' =$$

---

* В дальнейшем в написании интеграла по n-мерному пространству мы опускаем символ $\mathbf{R}^n$.

$$= \frac{1}{2\pi} \operatorname{Tr} \int \hat{f}(u', v') V(v') V(-v) U(u') U(-u) e^{\frac{ih}{2}(u'v' + uv - 2u'v)} du'\, dv' =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \operatorname{Tr} \int \hat{f}(u', v') V(v' - v) U(u' - u) e^{\frac{ih}{2}(u'v' + uv - 2u'v)} du'\, dv' =$$

$$= \frac{1}{h} \int \hat{f}(u', v') \delta(v' - v) \delta(u' - u) e^{\frac{ih}{2}(u'v' + uv - 2u'v)} du'\, dv' =$$

$$= \frac{1}{h} \hat{f}(u, v).$$

Положим в формуле (12) $u = v = 0$

$$\hat{f}(0, 0) = h \operatorname{Tr} A_f.$$

С другой стороны,

$$\hat{f}(0, 0) = \frac{1}{2\pi} \int f(p, q)\, dp\, dq,$$

и мы убеждаемся в справедливости формулы (1).

Теперь нам осталось найти по формуле (12) функции на фазовом пространстве, соответствующие $A_f \circ A_g$ и $\{A_f, A_g\}_h$, и убедиться, что при $h \to 0$ эти функции стремятся к fg и $\{f, g\}$. Сначала найдем функцию $F(p, q)$, соответствующую несимметризованному произведению $A_f A_g$. Для ее Фурье-образа имеем

$$\hat{F}(u, v) = h \operatorname{Tr} A_f A_g V(-v) U(-u) e^{\frac{ihuv}{2}} =$$

$$= h \operatorname{Tr} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2\, \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2) V(v_1) U(u_1) e^{\frac{ihu_1v_1}{2}} \times$$

$$\times V(v_2) U(u_2) e^{\frac{ihu_2v_2}{2}} V(-v) U(-u) e^{\frac{ihuv}{2}} =$$

$$= h \operatorname{Tr} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2\, \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2) \times$$

$$\times V(v_1 + v_2 - v) U(u_1 + u_2 - u) \times$$

$$\times \exp\left[\frac{ih}{2}(u_1v_1 + u_2v_2 + uv + 2u_1v_2 - 2u_1v - 2u_2v)\right].$$

Окончательно

$$A_f A_g \leftrightarrow \frac{1}{2\pi} \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2\, \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2)\, \delta(v_1 + v_2 - v) \times$$

$$\times \delta(u_1 + u_2 - u)\, e^{\frac{ih}{2}(u_1v_2 - u_2v_1)}. \qquad (13)$$

Показатель в экспоненте был преобразован с учетом стоящих под знаком интеграла δ-функций. Напомним, что преобразование Фурье $\hat{\Phi}(u, v)$ произведения двух функций $\Phi(p, q) =$

$= f(p, q) g(p, q)$ есть свертка преобразований Фурье сомножителей

$$\hat{\Phi}(u, v) =$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2 \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2)\, \delta(v_1 + v_2 - v)\, \delta(u_1 + u_2 - u).$$

Функция $\hat{F}(u, v)$ отличается от функции $\hat{\Phi}(u, v)$ множителем $e^{\frac{ih}{2}(u_1v_2 - u_2v_1)}$, который стоит под знаком интеграла. Этот множитель зависит от порядка операторов A_f и A_g, поэтому операторам A_fA_g и A_gA_f соответствуют разные функции на фазовом пространстве. В пределе при $h \to 0$ $e^{\frac{ih}{2}(u_1v_2 - u_2v_1)} \to 1$ и $F(p, q) \to \Phi(p, q)$. Разумеется, это утверждение справедливо и для функции $F_s(p, q)$, соответствующей симметризованному произведению $A_f \circ A_g$.

Обозначим через $G(p, q)$ функцию, соответствующую квантовой скобке Пуассона

$$\{A_f, A_g\}_h = \frac{i}{h}(A_fA_g - A_gA_f).$$

Из формулы (13) получаем

$$\hat{G}(u, v) =$$
$$= \frac{1}{2\pi h} \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2 \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2)\, \delta(v_1 + v_2 - v) \times$$
$$\times \delta(u_1 + u_2 - u)\left[e^{\frac{ih}{2}(u_1v_2 - u_2v_1)} - e^{\frac{ih}{2}(u_2v_1 - u_1v_2)}\right] =$$
$$= \frac{1}{\pi h} \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2 \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2)\, \delta(v_1 + v_2 - v) \times$$
$$\times \delta(u_1 + u_2 - u) \sin \frac{h}{2}(u_2v_1 - u_1v_2)$$

и при $h \to 0$

$$\hat{G}(u, v) \to \frac{1}{2\pi} \int du_1\, dv_1\, du_2\, dv_2 (u_2v_1 - u_1v_2) \hat{f}(u_1, v_1)\, \hat{g}(u_2, v_2) \times$$
$$\times \delta(v_1 + v_2 - v)\, \delta(u_1 + u_2 - u).$$

Интеграл, стоящий в правой части, является преобразованием Фурье от классической скобки Пуассона

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p},$$

так как преобразованиями Фурье производных $\frac{\partial f}{\partial q}$ и $\frac{\partial f}{\partial p}$ являются функции $-iv\hat{f}$ и $-iu\hat{f}$ соответственно.

Таким образом, мы проверили все утверждения, сделанные в начале параграфа.

В заключение приведем несколько примеров вычислений по формулам этого параграфа.

Найдем формулу для ядра оператора A_f в координатном представлении. Используя формулу

$$V(v)\,U(u)(x, x') = e^{-ivx}\delta(x - uh - x'),$$

получим

$$A_f(x, x') = \frac{1}{2\pi}\int \hat{f}(u, v)\, e^{-ivx}\,\delta(x - uh - x')\, e^{\frac{ihuv}{2}}\, du\, dv,$$

$$A_f(x, x') = \frac{1}{2\pi h}\int \hat{f}\left(\frac{x - x'}{h}, v\right) e^{-\frac{iv}{2}(x+x')}\, dv. \qquad (14)$$

Покажем, что $f(q) \longleftrightarrow f(Q)$. Для такой функции на фазовом пространстве

$$\hat{f}(u, v) = \frac{1}{2\pi}\int f(q)\, e^{ivq} e^{iup}\, dq\, dp = \tilde{f}(v)\,\delta(u).$$

Здесь через $\tilde{f}(v)$ обозначено преобразование Фурье функции одной переменной $f(q)$. Далее по формуле (14)

$$A_f(x, x') = \frac{1}{2\pi h}\int \delta\left(\frac{x - x'}{h}\right)\tilde{f}(v)\, e^{-\frac{iv}{2}(x+x')}\, dv =$$

$$= f\left(\frac{x + x'}{2}\right)\delta(x - x') = f(x)\,\delta(x - x'),$$

а оператор с таким ядром является оператором умножения на функцию $f(x)$. Точно так же в импульсном представлении легко проверить, что $f(p) \longleftrightarrow f(P)$.

Получим явную формулу, по которой можно найти классическое состояние, соответствующее пределу чистого квантового состояния при $h \to 0$.

Используя формулу обращения, найдем $\rho_1(q, p)$, соответствующую оператору P_ψ, и построим $\rho(q, p) = \rho_1/(2\pi h)$. Вектор ψ считаем заданным в координатном представлении. Из формулы

$$V(-v)\,U(-u)\,P_\psi\xi(x) = e^{ivx}\int \xi(x')\,\overline{\psi(x')}\, dx'\,\psi(x + uh)$$

следует, что

$$V(-v)\,U(-u)\,P_\psi(x, x') = e^{ivx}\psi(x + uh)\,\overline{\psi(x')},$$

$$\hat{\rho}(u, v) = \frac{1}{2\pi h}\, h\,\mathrm{Tr}\, V(-v)\,U(-u)\,P_\psi e^{\frac{ihuv}{2}} =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int e^{ivx}\psi(x + uh)\,\overline{\psi(x)}\, e^{\frac{ihuv}{2}}\, dx.$$

Если ввести функцию *

$$F(x, u) = \frac{1}{2\pi} \lim_{h \to 0} \psi(x + uh) \overline{\psi(x)}, \qquad (15)$$

то

$$\hat{\rho}(u, v) = \int e^{ivx} F(x, u)\, dx$$

есть Фурье-образ классической функции распределения, соответствующей пределу состояния P_ψ при $h \to 0$. Для самой функции распределения $\rho(q, p)$ справедлива формула

$$\rho(q, p) = \int e^{-ipu} F(q, u)\, du. \qquad (16)$$

Пусть $\psi(x)$ — непрерывная функция и не зависит от h как от параметра. Тогда

$$F(x, u) = \frac{1}{2\pi} |\psi(x)|^2$$

и

$$\rho(p, q) = |\psi(q)|^2 \delta(p).$$

Такому квантовому состоянию в пределе $h \to 0$ соответствует состояние покоящейся частицы с плотностью функции распределения координаты $|\psi(q)|^2$.

Пусть $\psi(x) = \varphi(x) e^{\frac{ip_0 x}{h}}$, где $\varphi(x)$ от h не зависит и непрерывна. В этом случае в пределе при $h \to 0$ мы придем к классическому состоянию с функцией распределения

$$\rho(p, q) = |\varphi(q)|^2 \delta(p - p_0).$$

На этих примерах мы видим, что чистому состоянию квантовой механики в пределе при $h \to 0$ может соответствовать смешанное классическое состояние.

§ 15. Одномерные задачи квантовой механики. Свободная одномерная частица

В § 15—20 мы рассмотрим одномерные задачи квантовой механики. Функция Гамильтона для частицы с одной степенью свободы в потенциальном поле имеет вид

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q).$$

Этой функции Гамильтона соответствует оператор Шредингера

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(Q).$$

* Этот предел не всегда является тривиальным, так как в физически интересных случаях функция $\psi(x)$ обычно зависит от h как от параметра (см. пример ниже).

Для свободной частицы $V = 0$. Мы начнем с изучения этой простейшей задачи квантовой механики. Найдем спектр оператора Шредингера

$$H = \frac{P^2}{2m}. \tag{1}$$

Уравнение для собственных векторов имеет вид

$$\frac{P^2}{2m}\psi = E\psi \tag{2}$$

или в координатном представлении

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi. \tag{3}$$

Удобно использовать систему единиц, в которой $h = 1$ и $m = 1/2$. Тогда уравнение (2) при $E > 0$ принимает вид

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad k^2 = E, \quad k > 0. \tag{4}$$

Последнее уравнение имеет два линейно-независимых решения

$$\psi_{\pm k}(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\pm ikx}. \tag{5}$$

Мы видим, что каждому значению $E > 0$ соответствует две собственных функции оператора H. При $E < 0$ уравнение (3) не имеет ограниченных на всей вещественной оси решений. Таким образом, спектр оператора Шредингера (1) — непрерывный, положительный, двукратный.

Функции (5) одновременно являются и собственными функциями оператора импульса $P = -i\frac{d}{dx}$, соответствующими собственным значениям $\pm k$. Заметим, что функции (5) не принадлежат $L^2(R)$ и поэтому не являются собственными функциями в обычном смысле. Для записи последующих формул удобно считать, что $-\infty < k < \infty$, $k = \pm\sqrt{E}$. Тогда оба решения (5) имеют вид

$$\psi_k(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{ikx}. \tag{6}$$

Нормирующий множитель в (6) выбран из условия

$$\int_{\mathbf{R}} \psi_k(x)\,\overline{\psi_{k'}(x)}\,dx = \delta(k - k'). \tag{7}$$

Столь же просто получаются решения уравнения (2) в импульсном представлении. При $m = 1$ уравнение (2) имеет вид

$$p^2\psi = k^2\psi, \tag{8}$$

а его решениями являются функции

$$\psi_k(p) = \delta(p - k), \; k = \pm\sqrt{E}. \tag{9}$$

Нормировка функций (9) выбрана такой же, как и функций (6),

$$\int_{\mathbf{R}} \psi_k(p)\,\overline{\psi_{k'}(p)}\,dp = \int_{\mathbf{R}} \delta(p-k)\,\delta(p-k')\,dp = \delta(k-k').$$

Для того чтобы выяснить физический смысл собственных функций ψ_k, построим решение нестационарного уравнения Шредингера для свободной частицы

$$i\,\frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t)$$

при начальном условии

$$\psi(0) = \varphi,\ \|\varphi\| = 1.$$

Проще всего эта задача решается в импульсном представлении

$$i\,\frac{\partial\psi(p,t)}{\partial t} = p^2\psi(p,t),$$

$$\psi(p,0) = \varphi(p),\ \int_{\mathbf{R}} |\varphi(p)|^2\,dp = 1.$$

Очевидно, что

$$\psi(p,t) = \varphi(p)\,e^{-ip^2t}.$$

В координатном представлении это же состояние описывается функцией

$$\psi(x,t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{\mathbf{R}} \varphi(p)\,e^{i(px-p^2t)}\,dp = \int_{\mathbf{R}} \varphi(k)\,\psi_k(x)e^{-ik^2t}\,dk. \qquad (10)$$

Легко проверить, что нормировка функции $\psi(x,t)$ не зависит от времени

$$\int_{\mathbf{R}} |\psi(x,t)|^2\,dx = \int_{\mathbf{R}} |\varphi(p)|^2\,dp = 1.$$

Формулу (10) можно рассматривать и как разложение решения уравнения Шредингера $\psi(x,t)$ по стационарным состояниям, т. е. как обобщение формулы (9.13) на случай непрерывного спектра. Роль коэффициентов C_n здесь играет функция $\varphi(k)$.

Состояние, описываемое функциями $\psi(x,t)$ или $\psi(p,t)$, имеет наиболее простой физический смысл в том случае, когда $\varphi(p)$ отлична от нуля в некоторой малой окрестности точки p_0. Состояния такого типа обычно называют волновыми пакетами. График функции $|\varphi(p)|^2$ изображен на рис. 4.

Напомним, что $|\psi(p,t)|^2 = |\varphi(p)|^2$ есть плотность функции распределения импульса. Тот факт, что эта плотность не зависит от времени, есть следствие закона сохранения импульса для свободной частицы. Если распределение $|\varphi(p)|^2$ сосредоточено

в окрестности точки p_0, то состояние $\psi(t)$ может быть истолковано как состояние с почти точно заданным импульсом.

Функция $|\psi(x,t)|^2$ есть плотность функции распределения координаты. Проследим за ее эволюцией во времени. Прежде всего из теоремы Римана — Лебега * следует, что для гладкой $\varphi(p)$ $\psi(x,t)\to 0$ при $|t|\to\infty$, поэтому стремится к нулю $\int_\Omega |\psi(x,t)|^2\,dx$, взятый по любой конечной области вещественной оси Ω. Это значит, что при $|t|\to\infty$ частица уходит из любой конечной области, т. е. движение инфинитно.

Для того чтобы более подробно проследить за движением частицы при больших $|t|$, используем метод стационарной фазы. Этот метод применяется для асимптотического вычисления интегралов вида

$$I(N)=\int_a^b F(x)\,e^{iNf(x)}\,dx \tag{11}$$

при $N\to\infty$. Для случая гладких функций $f(x)$ и $F(x)$ и при наличии одной точки стационарности $\tilde{x}$ функции $f(x)$ в интервале (a,b) $(f'(\tilde{x})=0,\ f''(\tilde{x})\neq 0)$ имеет место формула

$$I(N)=\left(\frac{2\pi}{N|f''(\tilde{x})|}\right)^{\frac{1}{2}}F(\tilde{x})\exp\left(iNf(\tilde{x})+\frac{i\pi}{4}\operatorname{sign}f''(\tilde{x})\right)+O\left(\frac{1}{N}\right). \tag{12}$$

Рис. 4.

Перепишем выражение для $\psi(x,t)$ в форме

$$\psi(x,t)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{\mathbf{R}}\varphi(p)e^{i|t|\left[\mp p^2+\frac{px}{|t|}\right]}dp.$$

Верхний знак в экспоненте соответствует $t>0$, нижний $t<0$, найдем асимптотику функции $\psi(x,t)$ при $t\to\pm\infty$ по формуле (12). Точка стационарности находится из условия

$$f'(\tilde{p})=\mp 2\tilde{p}+\frac{x}{|t|}=0,$$

* Теорема Римана — Лебега утверждает, что $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,e^{iNx}\,dx\to 0$ при $N\to\infty$, если функция $f(x)$ кусочно-непрерывна и абсолютно интегрируема на всей оси $-\infty<x<\infty$.

откуда $\tilde{p} = \frac{x}{2t}$. Далее $f''(\tilde{p}) = \mp 2$ и при $t \to \pm\infty$

$$\psi(x, t) = \varphi\left(\frac{x}{2t}\right)\left(\frac{1}{2|t|}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\chi(x, t)} + O\left(\frac{1}{|t|}\right), \tag{13}$$

где χ — вещественная функция, вид которой для дальнейшего неважен.

По предположению функция $\varphi(p)$ отлична от нуля только в малой окрестности точки p_0, поэтому $|\psi(x, t)|^2 = \left|\varphi\left(\frac{x}{2t}\right)\right|^2 \frac{1}{2|t|} + O\left(\frac{1}{|t|^{3/2}}\right)$ отлична от нуля только вблизи точки $x = 2p_0t$. Из этого соотношения видно, что область, в которой отлична от нуля вероятность найти частицу, перемещается вдоль оси x с постоянной скоростью $v = 2p_0$, т. е. остается справедливой классическая связь между импульсом и скоростью $p = mv$ (напомним, что мы положили $m = 1/2$). Далее из асимптотического выражения для $|\psi(x, t)|^2$ ясно, что для корня из дисперсии координаты $\Delta_\omega x$ при больших значениях $|t|$ справедлива формула

$$\Delta_\omega x \cong 2\,\Delta_\omega p\,|t|$$

или

$$\Delta_\omega x \cong \Delta_\omega v\,|t|.$$

Это означает, что область, в которой велика вероятность обнаружить частицу, передвигаясь вдоль оси x, будет расплываться со скоростью $\Delta_\omega v$.

Нетрудно понять без всяких вычислений, что поведение классической свободной частицы, находящейся в состоянии с ненулевыми дисперсиями координаты и импульса, будет точно таким же. Таким образом, квантовая механика приводит практически к тем же результатам для свободной частицы, что и классическая. Единственное отличие состоит в том, что в квантовой механике, согласно соотношению неопределенностей, нет состояний с нулевыми дисперсиями координаты и импульса.

Отметим еще некоторые формальные свойства решения уравнения Шредингера для свободной частицы. Из соотношения (13) следует, что

$$\psi(x, t) = O\left(\frac{1}{|t|^{1/2}}\right),$$

т. е. при любых x имеет место неравенство

$$|\psi(x, t)| < \frac{C}{|t|^{1/2}},$$

где C — некоторая константа. Естественно ожидать поэтому, что вектор $\psi(t)$ слабо стремится к нулю при $|t| \to \infty$. Проще всего это утверждение доказывается в импульсном представлении.

Для произвольного вектора $f \in L^2(\mathbf{R})$ имеем

$$(\psi(t), f) = \int_{\mathbf{R}} \varphi(p)\, e^{-ip^2t}\, \overline{f(p)}\, dp.$$

Последний интеграл стремится к нулю при $|t| \to \infty$ по теореме Римана — Лебега.

В координатном же представлении слабая сходимость к нулю $\psi(t)$ имеет очень простой смысл. Постоянный вектор f задается функцией, которая заметно отлична от нуля лишь в некоторой конечной области Ω, а область, в которой отлична от нуля функция $\psi(x, t)$, расплываясь, уходит на бесконечность. Поэтому $(\psi(t), f) \to 0$ при $|t| \to \infty$.

Проверим, что асимптотическое выражение (13) для функции $\psi(x, t)$ имеет правильную нормировку. При $|t| \to \infty$ имеем

$$\int_{\mathbf{R}} |\psi(x, t)|^2\, dx \cong \int_{\mathbf{R}} \frac{1}{2|t|} \left|\varphi\left(\frac{x}{2t}\right)\right|^2 dx = \int_{\mathbf{R}} |\varphi(k)|^2\, dk = 1.$$

§ 16. Гармонический осциллятор

В классической механике гармоническим осциллятором называется система с функцией Гамильтона

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2.$$

Параметр $\omega > 0$ имеет смысл частоты колебаний.

Оператор Шредингера соответствующей квантовомеханической системы имеет вид

$$H = \frac{P^2}{2} + \frac{\omega^2 Q^2}{2}. \qquad (1)$$

Мы используем систему единиц, в которой $m = 1$, $h = 1$. Наша задача найти собственные векторы и собственные значения оператора H. Мы решим эту задачу, используя только перестановочные соотношения Гейзенберга для операторов P и Q и не переходя к конкретному представлению. Для этого введем операторы

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega Q + iP), \qquad (2)$$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega Q - iP).$$

Используя соотношение Гейзенберга

$$[Q, P] = i, \qquad (3)$$

получим

$$\omega a a^* = \frac{1}{2}(\omega^2 Q^2 + P^2) + \frac{i\omega}{2}(-QP + PQ) = H + \frac{\omega}{2},$$

$$\omega a^* a = \frac{1}{2}(\omega^2 Q^2 + P^2) + \frac{i\omega}{2}(QP - PQ) = H - \frac{\omega}{2}$$

или

$$H = \omega a a^* - \frac{\omega}{2}, \qquad (4)$$

$$H = \omega a^* a + \frac{\omega}{2}. \qquad (5)$$

Из (4) и (5) сразу находим перестановочное соотношение для операторов a и a^*

$$[a, a^*] = 1. \qquad (6)$$

Из (6) легко проверяется по индукции, что

$$[a, (a^*)^n] = n(a^*)^{n-1}. \qquad (7)$$

Наконец, нам потребуются перестановочные соотношения операторов a и a^* с H. Для вычисления коммутатора $[H, a]$ достаточно умножить формулу (4) на a справа, (5) на a слева и найти разность полученных выражений

$$[H, a] = -\omega a. \qquad (8)$$

Аналогично

$$[H, a^*] = \omega a^*. \qquad (9)$$

Перейдем теперь к изучению спектра оператора H. Предположим, что существует хотя бы одно собственное значение E оператора H. Соответствующий собственный вектор мы обозначим через ψ_E. Покажем, что собственные значения E ограничены снизу. Вектор ψ_E по условию удовлетворяет уравнению $H\psi_E = E\psi_E$, которое может быть с учетом (5) переписано в виде

$$\left(\omega a^* a + \frac{\omega}{2}\right)\psi_E = E\psi_E.$$

Умножая это равенство слева на ψ_E, получим

$$\omega \| a\psi_E \|^2 + \frac{\omega}{2} \| \psi_E \|^2 = E \| \psi_E \|^2,$$

откуда сразу следует, что $E \geqslant \omega/2$, причем знак равенства возможен только при условии $a\psi_E = 0$. Из выражения (5) для H видно, что если некоторый вектор ψ удовлетворяет условию $a\psi = 0$, то он является собственным вектором оператора H, соответствующим собственному значению $\omega/2$.

Покажем, каким образом можно по произвольному собственному вектору ψ_E построить новые собственные векторы. Подсчитаем выражение $Ha\psi_E$, используя (8):

$$Ha\psi_E = aH\psi_E - \omega a\psi_E = (E - \omega) a\psi_E.$$

Из последнего соотношения видно, что либо $a\psi_E$ является собственным вектором, соответствующим собственному значению $E-\omega$, либо $a\psi_E=0$. Если $a\psi_E\neq 0$, то вектор $a^2\psi_E$ либо собственный с собственным значением $E-2\omega$, либо $a^2\psi_E=0$. Таким образом, по произвольному собственному вектору ψ_E может быть построена последовательность собственных векторов ψ_E, $a\psi_E$, ..., $a^N\psi_E$, соответствующих собственным значениям E, $E-\omega$, ..., $E-N\omega$. Эта последовательность, однако, не может быть бесконечной, так как собственные значения оператора H ограничены снизу числом $\omega/2$. Поэтому существует такое $N\geqslant 0$, что $a^N\psi_E\neq 0$, $a^{N+1}\psi_E=0$. Обозначим вектор $a^N\psi_E$ через ψ_0. Этот вектор удовлетворяет уравнениям

$$a\psi_0=0,\quad H\psi_0=\frac{\omega}{2}\psi_0. \tag{10}$$

Мы видим, что предположение о существовании хотя бы одного собственного вектора ψ_E эквивалентно предположению о существовании вектора ψ_0, удовлетворяющего (10). Вектор ψ_0 описывает основное состояние осциллятора, т. е. состояние с наименьшей энергией $\omega/2$.

Посмотрим, как действует оператор a^* на собственные векторы оператора H. Используя (9), получим

$$Ha^*\psi_E=a^*H\psi_E+\omega a^*\psi_E=(E+\omega)\,a^*\psi_E. \tag{11}$$

Обратим внимание на то, что $a^*\psi_E$ не может быть нулевым вектором. Действительно, из выражения (4) для оператора H видно, что вектор, удовлетворяющий уравнению $a^*\psi=0$, является собственным вектором H с собственным значением $-\omega/2$, что невозможно, так как $E\geqslant\omega/2$. Поэтому из (11) следует, что $a^*\psi_E$ является собственным вектором оператора H с собственным значением $(E+\omega)$. Аналогично $(a^*)^2\psi_E$ — собственный вектор с собственным значением $(E+2\omega)$. Начиная такое построение с вектора ψ_0, мы получим бесконечную последовательность собственных векторов ψ_0, $a^*\psi_0$, ..., $(a^*)^n\psi_0$, ..., соответствующих собственным значениям $\omega/2$, $\omega/2+\omega$, ..., $(n+1/2)\,\omega$, ... Пусть вектор ψ_0 нормирован $\|\psi_0\|=1$. Вычислим норму вектора $(a^*)^n\psi_0$

$$\|(a^*)^n\psi_0\|^2=((a^*)^n\psi_0,(a^*)^n\psi_0)=(\psi_0,a^{n-1}(a^*)^n a\psi_0)+$$
$$+n\left(\psi_0,a^{n-1}\left(a^*\right)^{n-1}\psi_0\right)=n\left\|\left(a^*\right)^{n-1}\psi_0\right\|^2=\;\dots\;=n!\;\;\|\psi_0\|^2=n!\;\dots$$

При вычислении использовалось перестановочное соотношение (7) и равенство (10).

Таким образом, последовательность нормированных собственных векторов оператора H можно задать формулой

$$\psi_n=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n\psi_0,\;n=0,1,2,\dots \tag{12}$$

Ортогональность векторов ψ_n, соответствующих различным собственным значениям, следует из общих соображений, но может быть проверена и непосредственно

$$(\psi_k, \psi_n) = \frac{1}{\sqrt{n!\,k!}} (\psi_0, a^k (a^*)^n \psi_0) = 0 \text{ при } k \neq n.$$

Последнее равенство получается из формул (7) и (10).

Обсудим теперь вопрос о единственности вектора ψ_0. Натянем на ортонормированную систему векторов ψ_n гильбертово пространство $\mathscr{H}$. Элементы $\varphi \in \mathscr{H}$ имеют вид

$$\varphi = \sum_n C_n \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0, \quad \sum_n |C_n|^2 < \infty. \tag{13}$$

В этом пространстве мы получим реализацию перестановочных соотношений Гейзенбера, если положить в соответствии с (2)

$$Q = \frac{a + a^*}{\sqrt{2\omega}}, \quad P = \frac{\sqrt{\omega}\,(a - a^*)}{i\sqrt{2}}. \tag{14}$$

Соотношение (3) тогда является следствием формулы (6). Пространство $\mathscr{H}$ инвариантно относительно действия операторов P и Q (точнее, относительно ограниченных функций $f(P)$ и $F(Q)$, например, $U(u)$ и $V(v)$) и не содержит подпространств, обладающих тем же свойством. Поэтому представление операторов Q и P формулами (14) в $\mathscr{H}$ неприводимо.

Если в некотором представлении существует два вектора ψ_0 и ψ_0', удовлетворяющих уравнению (10), то наряду с $\mathscr{H}$ может быть аналогично построено пространство $\mathscr{H}'$ по вектору ψ_0'. Это пространство будет инвариантным относительно P и Q, т. е. представление, в котором существует более одного решения уравнения (10), будет приводимым.

§ 17. Задача об осцилляторе в координатном представлении

В предыдущем параграфе мы чисто алгебраическим путем нашли спектр оператора Шредингера для осциллятора. Было сделано только одно предположение, что существует хотя бы один собственный вектор оператора H. Это эквивалентно существованию решения уравнения $a\psi_0 = 0$. Покажем, что в координатном представлении действительно существует единственное решение этого уравнения. Запишем операторы a и a^* в координатном представлении

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \left(\omega x + \frac{d}{dx}\right), \tag{1}$$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \left(\omega x - \frac{d}{dx}\right). \tag{2}$$

Уравнение $a\psi_0=0$ принимает вид

$$\omega x\psi_0(x)+\psi_0'(x)=0.$$

Разделяя переменные, получим

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0}=-\omega x\,dx$$

и
$$\psi_0(x)=Ce^{-\frac{\omega x^2}{2}}.$$

Постоянная C находится из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(x)|^2dx=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\omega x^2}dx=|C|^2\left(\frac{\pi}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}}=1.$$

Этому условию удовлетворяет $C=(\omega/\pi)^{1/4}$, и нормированная собственная функция для основного состояния имеет вид

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{\omega x^2}{2}}.$$

Собственные функции для возбужденных состояний $\psi_n(x)$ находятся по формуле (16.12) с учетом (2)

$$\psi_n(x)=\left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{(2\omega)^{-\frac{n}{2}}}{\sqrt{n!}}\left(\omega x-\frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{\omega x^2}{2}}.$$

Очевидно, что эти функции имеют вид

$$\psi_n(x)=P_n(x)e^{-\frac{\omega x^2}{2}},$$

где $P_n(x)$ — полином n-й степени. Можно показать, что $P_n(x)=H_n(\sqrt{\omega}x)$, где $H_n(\xi)$ — полином Чебышева — Эрмита. Известно, что система функций $H_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ полна в $L^2(\mathbf{R})$. Это утверждение, вообще говоря, следует из неприводимости координатного представления и результатов предыдущего параграфа.

Функция $|\psi_n(x)|^2$ является плотностью функции распределения координаты в n-м состоянии осциллятора. Интересно сравнить это распределение с соответствующим классическим распределением. Решение классической задачи об осцилляторе имеет вид

$$x(t)=A\sin(\omega t+\varphi), \qquad (3)$$

где A — амплитуда колебания, а φ — начальная фаза. Энергия колебаний может быть вычислена по формуле

$$E=\frac{\dot{x}^2}{2}+\frac{\omega^2x^2}{2}$$

и равна $\omega^2 A^2/2$. Соответствующая плотность функции распределения координаты имеет вид

$$F(x) = \delta(x - x(t)). \tag{4}$$

Ясно, что стационарное состояние квантового осциллятора ни при каких условиях не может переходить в классическое чистое состояние, задаваемое формулой (3). Естественно предположить, что пределом квантового состояния будет классическое смешанное состояние, являющееся выпуклой комбинацией (3)

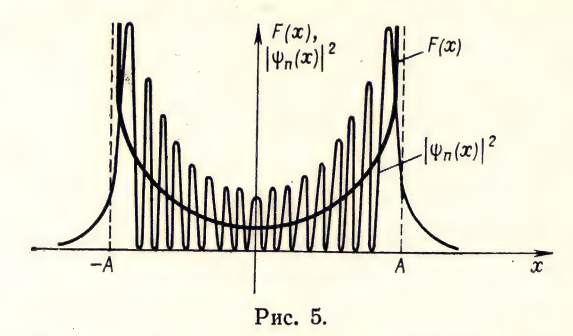


Рис. 5.

со случайными фазами φ. Для такого состояния плотность функции распределения координаты получается усреднением (4)

$$F(x) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \delta(A\sin(\omega t + \varphi) - x)\, d\varphi = \frac{1}{\pi}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \delta(A\sin\varphi - x)\, d\varphi =$$

$$= \frac{1}{\pi}\int_{A}^{A} \delta(y - x)\frac{1}{\sqrt{A^2 - y^2}} = \begin{cases} \dfrac{1}{\pi}\dfrac{1}{\sqrt{A^2 - x^2}}, & x \in (-A, A), \\ 0, & x \overline{\in} (-A, A), \end{cases}$$

или короче
$$F(x) = \frac{\theta(A^2 - x^2)}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}.$$

Графики функций $F(x)$ и $|\psi_n(x)|^2$ приведены на рис. 5 для достаточно большого n при условии, что* $E_n = h(n + 1/2)\omega = \omega^2 A^2/2$. При $n \to \infty$ квантовое распределение будет стремиться к классическому. Условие $n \to \infty$ при заданной энергии E может быть выполнено, если $h \to 0$.

Отметим важное отличие функций $F(x)$ и $|\psi_n(x)|^2$. Функция $F(x) = 0$ при $|x| > A$, т. е. классическая частица всегда находится между точками $-A$ и A (в классически разрешенной области). Функция $|\psi_n(x)|^2$ при $|x| > A$ в нуль не обращается. Это означает, что квантовая частица может быть обнаружена с конечной вероятностью в классически запрещенной

* Здесь мы для удобства явно выписываем постоянную Планка h, не считая, что $h = 1$.

области. Для произвольного потенциала $V(x)$ эта область определяется из условия, что полная энергия $E < V(x)$, что соответствует отрицательным значениям классической кинетической энергии.

§ 18. Представление состояний одномерной частицы в пространстве последовательностей l_2

Согласно результатам § 16 любой вектор $\varphi \in \mathscr{H}$ может быть разложен в ряд по собственным векторам оператора энергии гармонического осциллятора

$$\varphi = \sum_n C_n \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0, \quad \sum_n |C_n|^2 < \infty.$$

Каждый вектор $\varphi \in \mathscr{H}$ однозначно определяется последовательностью коэффициентов $\{C_n\}$, т. е.

$$\varphi \longleftrightarrow \{C_n\}.$$

Пусть $\psi \longleftrightarrow \{B_n\}$, тогда в силу ортонормированности системы векторов $\psi_n = \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0$

$$(\psi, \varphi) = \sum_n B_n \overline{C}_n.$$

Посмотрим, как действуют операторы в таком представлении. Для этого достаточно построить операторы a и a^*. Пусть $\varphi \longleftrightarrow \{C_n\}$, $a\varphi \longleftrightarrow \{C'_n\}$. Нам нужно выразить C'_n через C_n. Это можно сделать следующим образом:

$$a\varphi = a \sum_n C_n \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 = \sum_n C_n \frac{n\,(a^*)^{n-1}}{\sqrt{n!}} \psi_0 =$$

$$= \sum_n \sqrt{n}\, C_n \frac{(a^*)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} \psi_0 = \sum_n \sqrt{n+1}\, C_{n+1} \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0. \qquad (1)$$

При вычислении использовались соотношения $[a, (a^*)^n] = n(a^*)^{n-1}$, $a\psi_0 = 0$, последнее равенство получается при замене значка суммирования $n \to n+1$. Из (1) видно, что

$$C'_n = \sqrt{n+1}\, C_{n+1}. \qquad (2)$$

Аналогично

$$a^*\varphi = a^* \sum_n C_n \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 = \sum_n C_n \frac{(a^*)^{n+1}}{\sqrt{n!}} \psi_0 =$$

$$= \sum_n \sqrt{n+1}\, C_n \frac{(a^*)^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} \psi_0 = \sum_n \sqrt{n}\, C_{n-1} \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0.$$

Поэтому, если $\overset{*}{a}\varphi \leftrightarrow \{C_n''\}$, то

$$C_n'' = \sqrt{n}\, C_{n-1}. \tag{3}$$

Формулы (2) и (3) становятся особенно наглядными, если использовать матричные обозначения. Будем записывать последовательность $\{C_n\}$ в виде столбца

$$\varphi \leftrightarrow \begin{Vmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{Vmatrix}.$$

Тогда операторы a и a^* могут быть записаны при помощи матриц

$$a \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad a^* \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Проверим, что такая запись эквивалентна соотношениям (2) и (3). Действительно,

$$a\varphi \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{Vmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} \sqrt{1}\ C_1 \\ \sqrt{2}\ C_2 \\ \sqrt{3}\ C_3 \\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \end{Vmatrix},$$

что совпадает с формулой (2); аналогично проверяется связь формул (3) и (4). Для операторов a и a^* в представлении (4) сразу же проверяется перестановочное соотношение $[a, a^*] = 1$. Собственные векторы оператора H в этом представлении имеют вид

$$\psi_0 = \begin{Vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{Vmatrix}, \qquad \psi_1 = \begin{Vmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{Vmatrix}, \qquad \psi_2 = \begin{Vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{Vmatrix}, \ \ldots$$

Очевидно, что вектор ψ_0 удовлетворяет уравнению $a\psi_0 = 0$.

Операторы a^* и a часто называют операторами рождения и уничтожения возбуждения. Эти названия объясняются тем, что оператор a^* превращает состояние с энергией E в состояние

с большей энергией $E+\omega$, а оператор a — состояние с энергией E в состояние с энергией $E-\omega$ (основное состояние ψ_0 оператор a аннулирует). Иногда вводят так называемый оператор числа возбуждений $N=a^*a$. В нашем представлении он имеет вид

$$N \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}.$$

Собственные значения этого оператора совпадают с порядковым номером возбужденного состояния ψ_n.

Выпишем, наконец, операторы H, P и Q в рассматриваемом представлении

$$H=\omega a^*a+\frac{\omega}{2} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \frac{\omega}{2} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \frac{3}{2}\omega & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\omega & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$P=\frac{\sqrt{\omega}\,(a-a^*)}{i\sqrt{2}} \leftrightarrow \frac{\sqrt{\omega}}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \tag{6}$$

$$Q=\frac{a+a^*}{\sqrt{2\omega}} \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdot \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Из этих формул видно, что H представляется диагональной матрицей, т. е. рассматриваемое представление является собственным для оператора Шредингера гармонического осциллятора. Далее, сразу видно, что P и Q — самосопряженные операторы, и легко можно проверить выполнение перестановочного соотношения $[Q, P]=i$.

В связи с представлением состояний в пространстве l_2 хотелось бы несколько слов сказать о первоначальной матричной формулировке квантовой механики Гейзенберга. На начальном этапе развития квантовой механики основной была задача

о нахождении допустимых значений энергии системы. Рецепт, предложенный Гейзенбергом применительно к системе с одной степенью свободы, состоял в следующем. Рассматривалась классическая система с функцией Гамильтона $H(q, p) = p^2/2m + V(q)$. Строились самосопряженные матрицы Q и P, удовлетворяющие соотношению $[Q, P] = i$ (такие матрицы определены неоднозначно). Далее строилась матрица $H = P^2/2m + V(Q)$. Последний этап состоял в диагонализации этой матрицы, причем собственные значения матрицы H отождествлялись с допустимыми значениями энергии.

Формулы (6) и (7) дают пример матриц P и Q, удовлетворяющих перестановочным соотношениям Гейзенберга. Эти матрицы подобраны так, что матрица оператора H для осциллятора сразу является диагональной. Однако для произвольного H нельзя обойтись без этапа диагонализации.

Мы видим, что формулировка Гейзенберга по существу совпадает с современной формулировкой квантовой механики, если в качестве пространства состояний взять пространство l_2.

§ 19. Представление состояний одномерной частицы в пространстве целых аналитических функций $\mathscr{D}$

Рассмотрим множество функций комплексного переменного вида

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}, \qquad \sum_n |C_n|^2 < \infty. \tag{1}$$

Это множество функций $\mathscr{D}$ становится гильбертовым пространством, если скалярное произведение определить формулой

$$(f_1, f_2) = \frac{1}{\pi} \int f_1(z) \overline{f_2(z)} e^{-|z|^2} d\mu(z). \tag{2}$$

Интеграл берется по комплексной плоскости и $d\mu(z) = dx\,dy$.

Проверим, что функции $z^n/\sqrt{n!}$ образуют ортонормированный базис в $\mathscr{D}$. Для этого вычислим интеграл

$$I_{nm} = \int z^n \overline{z}^m e^{-|z|^2} d\mu(z) = \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \rho^{n+m} e^{i\varphi(n-m)} e^{-\rho^2}.$$

При $n \neq m$ $I_{mn} = 0$ за счет интегрирования по φ. При $n = m$ имеем

$$I_{nn} = 2\pi \int_0^{\infty} \rho^{2n+1} e^{-\rho^2} d\rho = \pi \int_0^{\infty} t^n e^{-t} dt = \pi n!$$

Произвольное состояние $\varphi \in \mathscr{H}$, $\varphi = \sum_n C_n \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0$ может быть представлено функцией $f(z) = \sum_n C_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}$, $\varphi \leftrightarrow f(z)$. Собственные векторы осциллятора ψ_n представляются базисными функциями $z^n/\sqrt{n!}$.

Посмотрим, как действуют операторы a и a^* в таком представлении. Используя выкладки, которые привели нас к формулам (18.2) и (18.3), мы можем записать векторы $a\varphi$ и $a\varphi^*$ в виде

$$a\varphi = \sum_n C_n \frac{n (a^*)^{n-1}}{\sqrt{n!}} \psi_0, \qquad a^*\varphi = \sum_n C_n \frac{(a^*)^{n+1}}{\sqrt{n!}} \psi_0.$$

Эти векторы представляются функциями

$$a\varphi \leftrightarrow \sum_n C_n \frac{nz^{n-1}}{\sqrt{n!}} = \frac{d}{dz} f(z),$$

$$a^*\varphi \leftrightarrow \sum_n C_n \frac{z^{n+1}}{\sqrt{n!}} = zf(z),$$

т. е. для операторов a и a^* мы получили представление

$$a \leftrightarrow \frac{d}{dz}, \quad a^* \leftrightarrow z.$$

Выпишем соответствующие формулы для операторов Q, P и H

$$Q \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \left(\frac{d}{dz} + z \right),$$

$$P \leftrightarrow \frac{\sqrt{\omega}}{i\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dz} - z \right),$$

$$H \leftrightarrow \omega \left(z \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \right).$$

Все основные соотношения $\left([a, a^*] = 1, \ [Q, P] = i, \ H\psi_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n \right)$ могут быть легко проверены в таком представлении. Построенное представление может оказаться удобным, если изучаемые наблюдаемые есть полиномы от Q и P.

§ 20. Общий случай одномерного движения

В предыдущих параграфах мы рассмотрели две одномерные задачи квантовой механики — задачи о свободной частице и о гармоническом осцилляторе. Свободная частица дает нам пример системы с непрерывным спектром для оператора Шре-

дингера, а гармонический осциллятор — с чисто точечным спектром. В большинстве реальных физических задач спектр оказывается более сложным. Рассмотрим задачу о спектре оператора Шредингера

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

при весьма общих предположениях о потенциале.

Обычно силы, действующие на частицу, заметно отличны от нуля в какой-то конечной области на оси x и стремятся к нулю при $|x| \to \infty$, поэтому наиболее часто встречаются потенциалы $V(x)$, которые стремятся к постоянным значениям при $x \to \pm\infty$. Для простоты рассуждений мы ограничимся случаем,

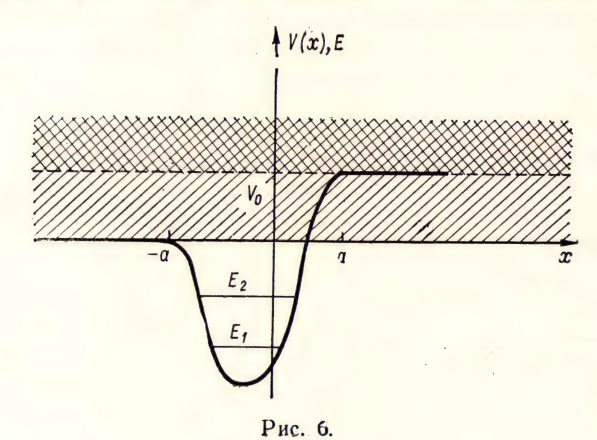


Рис. 6.

когда потенциал строго равен постоянным при $x < -a$ и при $x > a$. Используя произвол в определении потенциала, одну из этих постоянных всегда можно считать равной нулю.

Рассмотрим уравнения Шредингера

$$\psi'' + E\psi = V(x)\psi \tag{1}$$

при условии, что $V(x)$ — непрерывная функция на вещественной оси, и $V(x) = 0$ при $x < -a$, $V(x) = V_0$ при $x > a$. Для определенности будем считать, что $V_0 > 0$. График потенциала изображен на рис. 6.

При $x < -a$ и $x > a$ уравнение Шредингера (1) упрощается

$$\psi'' + E\psi = 0, \qquad x < -a, \tag{2}$$

$$\psi'' + (E - V_0)\psi = 0, \qquad x > a. \tag{3}$$

При любых значениях E существует два линейно-независимых решения уравнения (1), которые мы обозначим через ψ_1 и ψ_2. Общее решение этого уравнения

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2. \tag{4}$$

При изучении спектра оператора H нас интересуют либо квадратично интегрируемые решения уравнения (1), которые являются собственными функциями оператора H, либо решения, ограниченные на всей вещественной оси. При помощи последних может быть описан непрерывный спектр оператора H.

Рассмотрим теперь три случая.

1) $E < 0$.

Уравнения (2) и (3) перепишем в виде

$$\psi'' - \varkappa^2\psi = 0, \qquad x < -a, \qquad \varkappa^2 = -E > 0, \qquad \varkappa > 0,$$

$$\psi'' - \varkappa_1^2\psi = 0, \qquad x > a, \qquad \varkappa_1^2 = -(E - V_0) > 0, \qquad \varkappa_1 > 0.$$

Линейно-независимыми решениями этих уравнений являются функции $e^{\pm\varkappa x}$ при $x < -a$ и $e^{\pm\varkappa_1 x}$ при $x > a$. Поэтому произвольное решение (4) уравнения (1) в области $x < -a$ имеет вид $C_1'e^{-\varkappa x} + C_2'e^{\varkappa x}$, а в области $x > a$ — $C_1''e^{-\varkappa_1 x} + C_2''e^{\varkappa_1 x}$. Здесь C_1', C_2', C_1'' и C_2'' — некоторые постоянные, линейно зависящие от C_1 и C_2 формулы (4). Решение ψ будет квадратично интегрируемым при условиях $C_1' = 0$ и $C_2'' = 0$. Уже одного из этих условий достаточно для того, чтобы ψ была определена с точностью до численного множителя. Из условия $C_1' = 0$ может быть найдено отношение коэффициентов C_1 и C_2, которые будут зависеть от параметра E,

$$\frac{C_1}{C_2} = F_1(E).$$

Аналогично из условия $C_2'' = 0$ получим

$$\frac{C_1}{C_2} = F_2(E).$$

Квадратично интегрируемое решение ψ будет существовать только при тех значениях E, для которых

$$F_1(E) = F_2(E).$$

Корни этого алгебраического уравнения, если они существуют, являются собственными значениями оператора H. Из приведенных соображений естественно ожидать наличие простого точечного спектра при $E < 0$.

2) $0 < E < V_0$.

Уравнения (2) и (3) запишем в виде

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \qquad x < -a, \qquad k^2 = E > 0, \qquad k > 0,$$

$$\psi'' - \varkappa_1^2\psi = 0, \qquad x > a, \qquad \varkappa_1^2 = -(E - V_0) > 0, \qquad \varkappa_1 > 0.$$

Линейно-независимыми решениями являются функции $e^{\pm ikx}$ при $x < -a$ и $e^{\pm\varkappa_1 x}$ при $x > a$. Сразу видно, что квадратично интегрируемых решений нет, а ограниченное решение может быть

построено, если выбрать C_1/C_2 так, чтобы ψ имела вид $C_1''e^{-\varkappa x}$ при $x > a$. Поэтому в интервале $0 < E < V_0$ спектр является простым непрерывным.

3) $E > V_0$.

В этом случае оба уравнения (2) и (3) имеют осциллирующие решения ($e^{\pm ikx}$ при $x < -a$ и $e^{\pm ik_1x}$ при $x > a$, $k_1^2 = E - V_0$), поэтому любое решение уравнения (1) является ограниченным, а квадратично интегрируемых решений нет. Спектр оператора H при $E > V_0$ — непрерывный, двукратный.

На рис. 6 собственные значения оператора H изображены горизонтальными линиями, обычной штриховкой показана область простого непрерывного спектра, а двойной штриховкой — область двукратного спектра.

Обсудим физический смысл решений уравнения (1). Квадратично интегрируемые решения описывают стационарные состояния с энергией, равной собственному значению. Эти функции экспоненциально убывают при $|x| \to \infty$, поэтому вероятность обнаружить частицу вне некоторой конечной области близка к нулю. Ясно, что такие состояния соответствуют финитному движению частицы. Собственные функции непрерывного спектра непосредственного физического смысла не имеют, так как они не принадлежат пространству состояний. Однако с их помощью могут быть построены состояния типа волновых пакетов, которые мы рассматривали для свободной частицы. Эти состояния могут быть истолкованы как состояния с почти заданной энергией. Изучение эволюции таких состояний показывает, что они описывают частицу, которая при $|t| \to \infty$ уходит на бесконечность (инфинитное движение). К этому вопросу мы еще вернемся, когда будем изучать теорию рассеяния.

В классической механике, как и в квантовой, при $E < 0$ движение является финитным, а при $E > 0$ — инфинитным. При $0 < E < V_0$ частица может уйти на бесконечность по одному направлению, а при $E > V_0$ — по двум. Обратим внимание на то, что кратность непрерывного спектра совпадает с числом направлений, по которым частица может уйти на бесконечность.

На примере частицы в одномерной потенциальной яме рассмотрим вопрос о классическом пределе квантовых стационарных состояний. Для вычисления предела (14.15) удобно использовать асимптотический вид решения уравнения Шредингера при $h \to 0$. Методы построения асимптотических решений уравнения Шредингера при $h \to 0$ носят название квазиклассических методов. Мы применим один из таких методов — метод Венцеля, Крамерса, Бриллюэна (ВКБ).

Уравнение Шредингера запишем в виде

$$\psi'' + \frac{E - V(x)}{h^2}\psi = 0. \tag{5}$$

Здесь, как и прежде, мы используем систему единиц, в которой $m = 1/2$. Полагая $\psi(x) = \exp\left[\frac{i}{h}\int\limits_{x_0}^{x} g(x)\,dx\right]$, получим уравнение для функции $g(x)$

$$ihg' - g^2 + E - V = 0. \tag{6}$$

Решение этого уравнения будем искать в виде ряда по степеням h/i

$$g(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{h}{i}\right)^k g_k(x). \tag{7}$$

Подставляя (7) в (5), имеем

$$-\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{h}{i}\right)^n g'_{n-1} - \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\left(\frac{h}{i}\right)^n g_k g_{n-k} - g_0^2 + E - V = 0.$$

Приравнивая коэффициенты при $(h/i)^n$, получим систему реккурентных уравнений для функций $g_k(x)$:

$$g_0^2 = E - V, \tag{8}$$

$$g'_{n-1} = -\sum_{k=0}^{n} g_k g_{n-k}. \tag{9}$$

Из (8) находим $g_0(x)$

$$g_0(x) = \pm\sqrt{E - V(x)} = \pm p(x).$$

Здесь $p(x)$ при $E \geqslant V(x)$ есть классическое выражение для абсолютной величины импульса частицы с энергией E в поле $V(x)$. При $E < V(x)$ функция $p(x)$ становится чисто мнимой. Полагая $n = 1$, из (9) получаем

$$g'_0 = -2g_0 g_1, \quad g_1 = -\frac{1}{2}\frac{g'_0}{g_0} = -\frac{1}{2}\frac{d}{dx}\ln|p(x)|.$$

Ограничиваясь этими членами разложения (7), получим асимптотический вид при $h \to 0$ для двух линейно-независимых решений уравнений Шредингера

$$\psi_{1,2}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left[\pm\frac{i}{h}\int\limits_{x_0}^{x} p(x)\,dx\right] + O(h) \tag{10}$$

при $p(x) \neq 0$. Функции (10) иногда называют ВКБ-решениями уравнения Шредингера.

Точная теория метода ВКБ довольно сложна. Известно, что ряд (7) в общем случае расходится и представляет собой асимптотический ряд. Конечное число членов этого ряда позволяет построить хорошее приближение для функции ψ, если постоян-

ную Планка h можно считать достаточно малой в условиях конкретной задачи.

В дальнейшем будем считать, что потенциал $V(x)=0$ при $|x|\geqslant a$ и пусть $E<0$. Предположим, что при $\min\limits_x V(x)<E<0$ имеется две точки x_1 и x_2 $(-a\leqslant x_1<x_2\leqslant a)$, удовлетворяющие условию $E-V(x)=0$. Это так называемые точки поворота, в которых частица, согласно классической механике меняет направление движения на противоположное. Нетрудно понять, что в классически запрещенной области ($x<x_1$ или $x>x_2$) одно из ВКБ-решений экспоненциально возрастает, а второе — затухает при удалении от точки поворота в глубь запрещенной области. При $|x|>a$ ВКБ-решения совпадают с точными и имеют вид $e^{\pm\varkappa x}$, где $E=-\varkappa^2$. Вспомним, что собственная функция дискретного спектра оператора H экспоненциально убывает при $x\to\pm\infty$. При $h\to 0$ собственная функция в разрешенной области должна совпадать с некоторой линейной комбинацией ВКБ-решений $C_1\psi_1+C_2\psi_2$. Построение такой линейной комбинации является сравнительно сложной задачей, так как ВКБ-решения теряют смысл в точках поворота. Можно показать, что условия убывания функции $\psi(x)$ при $x\to-\infty$ выполняются, если

$$\psi(x)=\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\frac{1}{h}\int\limits_{x_1}^{x}p(x)\,dx+\frac{\pi}{4}\right)+O(h). \tag{11}$$

Аналогично из условий убывания при $x\to+\infty$ следует, что

$$\psi(x)=\frac{C'}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\frac{1}{h}\int\limits_{x}^{x_2}p(x)\,dx+\frac{\pi}{4}\right)+O(h). \tag{12}$$

Эти два выражения для $\psi(x)$ совпадают, если

$$\int\limits_{x_1}^{x_2}p(x)\,dx=\pi h\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots \tag{13}$$

Условие (13) определяет собственные значения энергии в квазиклассическом приближении и соответствует правилу квантования Бора — Зоммерфельда в старой квантовой теории.

Перейдем к вычислению классического предела квантового состояния. Предел при $h\to 0$ можно находить при различных условиях. Можно, например, рассмотреть состояние, соответствующее собственному значению энергии E_n при фиксированном значении числа n из условия (13). Легко видеть, что тогда $E_n\to V_0=\min\limits_x V(x)$ при $h\to 0$ и в пределе получится состояние покоящейся частицы на дне потенциальной ямы. Мы разберем более интересный случай: $h\to 0$, $n\to\infty$, а энергия E остается постоянной. (Заметим, что в данном случае интеграл в левой

части (13) от h не зависит и $h \to 0$, пробегая некоторую последовательность значений.) Подставляя в формулу (14.15) асимптотическое выражение (11) для $\psi(x)$, получим

$$F(x, u) = \frac{1}{2\pi} \lim_{h \to 0} \psi(x + uh) \overline{\psi(x)} =$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{C}{\sqrt{p(x + uh)\, p(x)}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_{x_1}^{x+uh} p(x)\, dx + \frac{\pi}{4} \right) \times$$

$$\times \sin\left(\frac{1}{h} \int_{x_1}^{x} p(x)\, dx + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{C}{p(x)} \lim_{h \to 0} \left[\cos\left(\frac{1}{h} \int_{x}^{x+hu} p(x)\, dx \right) - \right.$$

$$\left. - \cos\left(\frac{1}{h} \int_{x_1}^{x+uh} p(x)\, dx + \frac{1}{h} \int_{x_1}^{x} p(x)\, dx + \frac{\pi}{2} \right) \right].$$

Все нормировочные множители мы обозначаем буквой C. Предел второго слагаемого в смысле обобщенных функций равен нулю, поэтому

$$F(x, u) = \frac{C}{p(x)} \cos(p(x)\, u).$$

Используя (14.16), найдем функцию распределения для предельного классического состояния

$$\rho(q, p) = \frac{C}{p(q)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipu} \cos(p(q)\, u)\, du =$$

$$= \frac{C}{p(q)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipu} \left(e^{ip(q)u} + e^{-ip(q)u} \right) du.$$

Окончательно получим

$$\rho(q, p) = \frac{C}{p(q)} \left[\delta(p - p(q)) + \delta(p + p(q)) \right]. \qquad (14)$$

Состояние, описываемое функцией $\rho(q, p)$, имеет очень простой смысл. В этом состоянии плотность функции распределения координаты обратно пропорциональна классической скорости частицы, а импульс частицы в точке q с равной вероятностью может принимать два значения $\pm p(q)$. Формула (14) была получена для разрешенной области. Нетрудно таким же способом проверить, что в запрещенной области $\rho(q, p) = 0$.

§ 21. Трехмерные задачи квантовой механики. Трехмерная свободная частица

Оператор Шредингера для свободной частицы в координатном представлении имеет вид

$$H = -\frac{h^2}{2m} \Delta. \qquad (1)$$

Уравнение для собственных функций (при $h=1$, $m=1/2$)

$$-\Delta\psi = k^2\psi, \qquad E = k^2 > 0 \tag{2}$$

имеет решения

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \tag{3}$$

Нормировочная константа выбрана из условия

$$\int\limits_{\mathbf{R}^3} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\,\overline{\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{x})}\,d\mathbf{x} = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}').$$

Мы видим, что спектр оператора H является положительным, непрерывным, бесконечнократным. Каждому направлению вектора $\mathbf{k}$ соответствует собственная функция (3) с собственным значением k^2. Поэтому собственных функций столько, сколько точек на единичной сфере.

Решение задачи Коши для нестационарного уравнения Шредингера

$$i\frac{d\psi}{dt} = H\psi, \qquad \psi(0) = \varphi,$$

как и в одномерном случае, легче всего получить в импульсном представлении:

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{p},\,t)}{\partial t} = p^2\psi(\mathbf{p},\,t), \qquad \psi(\mathbf{p},\,0) = \varphi(\mathbf{p}).$$

Очевидно, что

$$\psi(\mathbf{p},\,t) = \varphi(\mathbf{p})\,e^{-ip^2t}.$$

Переходя к координатному представлению, получим

$$\psi(\mathbf{x},\,t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} \varphi(\mathbf{p})\,e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x}-p^2t)}\,d\mathbf{p} = \int\limits_{\mathbf{R}^3} \varphi(\mathbf{k})\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\,e^{-ik^2t}\,d\mathbf{k}.$$

Так же, как и в одномерном случае, функции $\psi(\mathbf{x}, t)$ или $\psi(\mathbf{p}, t)$ описывают инфинитное движение частицы с независящей от времени функцией распределения импульса. Используя метод стационарной фазы, можно показать, что область, в которой велика вероятность обнаружить частицу, перемещается с классической скоростью $\mathbf{v} = 2\mathbf{p}_0$ (мы считаем, что носитель функции $\varphi(\mathbf{p})$ сосредоточен в окрестности точки $\mathbf{p}_0$). Справедлива оценка

$$|\psi(\mathbf{x},\,t)| < \frac{C}{|t|^{3/2}},$$

где C — некоторая постоянная. Наконец, как и в одномерном случае,

$$\lim_{t\to\infty}(\xi,\,\psi(t)) = 0$$

для любого $\xi \in \mathscr{H}$.

§ 22. Трехмерная частица в потенциальном поле

Оператор Шредингера для частицы в потенциальном поле в координатном представлении имеет вид

$$H = -\frac{h^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}).$$

Важность задачи о движении частицы в потенциальном поле объясняется тем, что к ней сводится (как и в классической механике) задача о движении двух тел. Покажем, как это делается в квантовой механике. Рассмотрим систему двух частиц с массами m_1 и m_2, взаимодействие между которыми описывается потенциалом $V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$. Запишем оператор Шредингера этой системы в координатном представлении

$$H = -\frac{h^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{h^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2).$$

Здесь Δ_1 и Δ_2 — операторы Лапласа по координатам первой и второй частиц соответственно.

Введем новые переменные

$$\mathbf{X} = \frac{m_1\mathbf{x}_1 + m_2\mathbf{x}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2,$$

$\mathbf{X}$ — координаты центра инерции системы, а $\mathbf{x}$ — относительные координаты. С помощью простых вычислений получим выражение для H в новых переменных:

$$H = -\frac{h^2}{2M}\Delta_{\mathbf{x}} - \frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}).$$

Здесь $M = m_1 + m_2$ — полная масса системы, а $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ — так называемая приведенная масса. Первое слагаемое в H может быть истолковано как оператор кинетической энергии центра инерции системы, а оператор

$$H_1 = -\frac{h^2}{2\mu}\Delta + V(\mathbf{x})$$

является оператором Шредингера для относительного движения. В уравнении

$$H\Psi = E\Psi$$

переменные разделяются, и решения такого уравнения можно искать в виде

$$\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) = \psi(\mathbf{X})\,\psi_1(\mathbf{x}).$$

Функции $\psi(\mathbf{X})$ и $\psi_1(\mathbf{x})$ удовлетворяют уравнениям $(h = 1)$

$$-\frac{1}{2M}\Delta\psi(\mathbf{X}) = \varepsilon\psi(\mathbf{X}),$$

$$-\frac{1}{2\mu}\Delta\psi_1(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\,\psi_1(\mathbf{x}) = \varepsilon_1\psi_1(\mathbf{x}),$$

причем $E = \varepsilon + \varepsilon_1$. Первое из этих уравнений имеет решения

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{X}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{X}}, \qquad \frac{K^2}{2M} = \varepsilon;$$

задача сводится к решению второго уравнения, которое по форме совпадает с уравнением Шредингера для частицы с массой μ в потенциальном поле $V(\mathbf{x})$. Отметим, что спектр оператора H является всегда непрерывным, так как непрерывным является спектр оператора $-\frac{1}{2M}\Delta$.

Наиболее важным случаем задачи о движении частицы в потенциальном поле является задача о движении в поле силового центра. В этом случае потенциал $V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|)$ зависит только от $|\mathbf{x}| = r$. К задаче о центральном поле сводится задача двух частиц, если потенциал взаимодействия зависит только от расстояния между частицами. Прежде чем переходить к рассмотрению этой задачи, мы изучим свойства момента импульса и некоторые вопросы из теории представлений группы вращений, что позволит нам явно учесть сферическую симметрию задачи.

§ 23. Момент импульса

В квантовой механике операторы проекций момента импульса определяются формулами

$$\begin{aligned} L_1 &= Q_2P_3 - Q_3P_2, \\ L_2 &= Q_3P_1 - Q_1P_3, \\ L_3 &= Q_1P_2 - Q_2P_1. \end{aligned} \tag{1}$$

Введем еще одну наблюдаемую, которая называется квадратом момента импульса

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2. \tag{2}$$

Найдем перестановочные соотношения для операторов L_1, L_2, L_3 и L^2. Используя соотношения Гейзенберга $[Q_j, P_k] = i\delta_{jk}$ и свойства коммутаторов, получим

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= [Q_2P_3 - Q_3P_2,\ Q_3P_1 - Q_1P_3] = \\ &= Q_2P_1[P_3, Q_3] + Q_1P_2[Q_3, P_3] = i(Q_1P_2 - Q_2P_1) = iL_3. \end{aligned}$$

Таким образом, операторы L_1, L_2, L_3 удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= iL_3, \\ [L_2, L_3] &= iL_1, \\ [L_3, L_1] &= iL_2. \end{aligned} \tag{3}$$

Нетрудно проверить, что все операторы L_1, L_2, L_3 коммутируют с L^2

$$[L_j, L^2] = 0, \qquad j = 1, 2, 3. \tag{4}$$

Действительно,

$$[L_1, L^2] = [L_1, L_1^2 + L_2^2 + L_3^2] = [L_1, L_2^2] + [L_1, L_3^2] =$$
$$= [L_1, L_2] L_2 + L_2 [L_1, L_2] + [L_1, L_3] L_3 + L_3 [L_1, L_3] =$$
$$= iL_3L_2 + iL_2L_3 - iL_2L_3 - iL_3L_2 = 0.$$

При вычислении использовались свойства коммутаторов и формулы (3).

Из перестановочных соотношений (3) и (4) следует, что проекции момента импульса не являются одновременно измеримыми величинами. Одновременно измерены могут быть квадрат момента импульса и одна из его проекций.

Выпишем операторы проекций момента импульса в координатном представлении

$$L_1 = i\left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3}\right),$$
$$L_2 = i\left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1}\right),$$
$$L_3 = i\left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}\right).$$

Нетрудно убедиться, что операторы L_1, L_2, L_3 действуют только на угловые переменные функции $\psi(\mathbf{x})$. Действительно, если функция ψ зависит только от r, то

$$L_3\psi(r) = i\left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}\right)\psi\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right) =$$
$$= i\psi'\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right)\left(x_2 \cdot 2x_1 - x_1 \cdot 2x_2\right) = 0.$$

Для дальнейшего полезной окажется формула

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2} L^2, \tag{5}$$

которую мы тоже проверим в декартовых координатах. Для этого вычислим оператор $-L^2$, используя обозначения x, y, z для проекций $\mathbf{x}$:

$$-L^2 = \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right)^2 =$$
$$= (x^2 + y^2 + z^2)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} -$$
$$- 2xy \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - 2yz \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} - 2zx \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} - 2x \frac{\partial}{\partial x} - 2y \frac{\partial}{\partial y} - 2z \frac{\partial}{\partial z}.$$

Учитывая соотношения

$$r\frac{\partial}{\partial r}=x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z},$$

$$\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2=x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+y^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}+z^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}+x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}+$$
$$+2xy\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}+2yz\frac{\partial^2}{\partial y\,\partial z}+2zx\frac{\partial^2}{\partial z\,\partial x},$$

получим $-L^2=r^2\Delta-\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2-r\frac{\partial}{\partial r}=r^2\Delta-\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right).$

§ 24. Группа вращений

Обозначим через G совокупность всех вращений пространства $\mathbf{R}^3$ вокруг начала координат. Каждое вращение $g\in G$ порождает линейное преобразование трехмерного пространства

$$\mathbf{x}'=g\mathbf{x},$$

где теперь мы буквой g обозначили матрицу $\|g_{ik}\|$, которая называется матрицей вращения. Хорошо известно, что g является ортогональной матрицей и $\det g=1$. Верно и обратное: каждой такой матрице соответствует определенное вращение. Поэтому в дальнейшем мы будем отождествлять вращения и их матрицы. Группа вещественных ортогональных матриц третьего порядка с определителем, равным единице, называется группой $SO(3)$ или группой вращений.

Существует несколько способов параметризации вращений. Так, в теоретической механике часто используются углы Эйлера. Для наших целей наиболее удобно задавать вращение вектором $\mathbf{a}=\mathbf{n}\alpha$ $(|\mathbf{n}|=1)$, который направлен по оси вращения $\mathbf{n}$ и длина которого α равна углу поворота. При этом считается, что направление вращения и направление вектора $\mathbf{a}$ образуют правый винт, и угол поворота α не превосходит π $(0\leqslant\alpha\leqslant\pi)$. Если откладывать векторы $\mathbf{a}$ от одной точки, то их концы будут заполнять шар радиуса π. Различным внутренним точкам этого шара будут соответствовать различные вращения, а диаметрально противоположным точкам границы — одинаковые вращения.

Таким образом, группа вращений топологически эквивалентна шару, у которого отождествлены противоположные точки границы.

Установим связь между группой вращений и алгеброй Ли кососимметрических матриц третьего порядка.

Матрица A называется кососимметрической, если $A'=-A$. Произвольная кососимметрическая матрица задается тремя

параметрами и имеет вид

$$A=\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} \\ -a_{12} & 0 & a_{23} \\ -a_{13} & -a_{23} & 0 \end{pmatrix}.$$

Совокупность кососимметрических матриц становится алгеброй Ли, если в качестве лиевской операции взять коммутатор $[A, B]$. Это утверждение следует из свойств коммутаторов и равенства $[A, B]' = -[A, B]$. Последнее проверяется непосредственно:

$$[A,\ B]' = (AB - BA)' = B'A' - A'B' = BA - AB = -[A,\ B].$$

В качестве образующих алгебры Ли удобно выбрать матрицы

$$A_1=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\quad A_2=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad A_3=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Любая кососимметрическая матрица может быть представлена в виде

$$A(\mathbf{a}) = a_1A_1 + a_2A_2 + a_3A_3.$$

Найдем перестановочные соотношения для матриц A_1, A_2 и A_3

$$[A_1,\ A_2] = A_1A_2 - A_2A_1 =$$

$$=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}=A_3,$$

и искомые соотношения имеют вид

$$\begin{aligned} [A_1,\ A_2] &= A_3, \\ [A_2,\ A_3] &= A_1, \\ [A_3,\ A_1] &= A_2. \end{aligned} \tag{1}$$

Непосредственно может быть проверена формула

$$[A(\mathbf{a}),\ A(\mathbf{b})] = A(\mathbf{a}\times\mathbf{b}).$$

Рассмотрим матрицу $e^{\alpha A_3}$. Для того чтобы получить явное выражение для этой матрицы, вычислим целые степени матрицы A_3

$$A_3^2=\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}=-\tilde{I}_3,\ A_3^3=-A_3,\ A_3^4=\tilde{I}_3,\ \ldots$$

Раскладывая $e^{\alpha A_3}$ в ряд получим

$$e^{\alpha A_3}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n A_3^n}{n!}=I+\tilde{I}_3\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k\alpha^{2k}}{(2k)!}+A_3\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}\alpha^{2k-1}}{(2k-1)!}=$$

$$=I+\tilde{I}_3(\cos\alpha-1)+A_3\sin\alpha$$

или
$$e^{\alpha A_3}=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Мы видим, что $e^{\alpha A}$ является вращением вокруг третьей оси на угол α, т. е. $g(0, 0, \alpha)=e^{\alpha A_3}$. Аналогично проверяется, что $g(\alpha, 0, 0)=e^{\alpha A_1}$ и $g(0, \alpha, 0)=e^{\alpha A_2}$. Для вращений вокруг оси координат мы будем использовать сокращенное обозначение $g_i(\alpha)$, $i=1, 2, 3$.

Инфинитезимальными образующими группы вращений называются матрицы $\left.\frac{\partial g(\mathbf{a})}{\partial a_i}\right|_{\mathbf{a}=0}$. Используя формулы для вращений вокруг осей координат, получим

$$\left.\frac{\partial g(\mathbf{a})}{\partial a_1}\right|_{\mathbf{a}=0}=\left.\frac{\partial g(a_1, 0, 0)}{\partial a_1}\right|_{a_1=0}=\left.\frac{\partial e^{a_1A_1}}{\partial a_1}\right|_{a_1=0}=A_1.$$

Аналогично

$$\left.\frac{\partial g(\mathbf{a})}{\partial a_2}\right|_{\mathbf{a}=0}=A_2,\qquad \left.\frac{\partial g(\mathbf{a})}{\partial a_3}\right|_{\mathbf{a}=0}=A_3.$$

Мы видим, что кососимметричные матрицы A_1, A_2, A_3 являются инфинитезимальными образующими группы вращений.

Теперь мы легко можем получить формулу для произвольного вращения $g(\mathbf{n}\alpha)$. Очевидно, что произведение вращений вокруг одной оси $\mathbf{n}$ на углы α и β есть вращение на угол $\alpha+\beta$ вокруг той же оси:

$$g(\mathbf{n}\beta)\,g(\mathbf{n}\alpha)=g(\mathbf{n}(\alpha+\beta)).$$

Дифференцируя это тождество по β и полагая $\beta=0$, получим

$$(n_1A_1+n_2A_2+n_3A_3)\,g(\mathbf{n}\alpha)=\frac{d}{d\alpha}g(\mathbf{n}\alpha).$$

Мы нашли дифференциальное уравнение для $g(\mathbf{n}\alpha)$, которое нужно решить при начальном условии $g(\mathbf{n}0)=I$. Единственное решение этой задачи имеет вид

$$g(\mathbf{n}\alpha)=\exp\left[(n_1A_1+n_2A_2+n_3A_3)\,\alpha\right]. \qquad (2)$$

§ 25. Представления группы вращений

Представлением группы вращений G в гильбертовом пространстве $\mathscr{E}$ называется отображение W, которое каждому элементу g группы G ставит в соответствие ограниченный линейный

и непрерывно зависящий от g оператор $W(g)$ в пространстве $\mathscr{E}$ так, что выполняются условия

1) $W(I) = I$,
2) $W(g_1g_2) = W(g_1)W(g_2)$.

В условии 1) слева I означает единичное вращение, а справа — единичный оператор в $\mathscr{E}$. Из условий 1) и 2) сразу следует, что

$$W(g^{-1}) = W^{-1}(g).$$

Представление называется унитарным, если унитарны операторы $W(g)$, т. е. $W^*(g) = W^{-1}(g)$.

В теории групп доказывается, что любое представление группы вращений эквивалентно некоторому унитарному представлению, поэтому можно ограничиться изучением унитарных представлений.

Напомним два эквивалентных определения неприводимого представления:

1) представление называется неприводимым, если не существует оператора, отличного от CI, который коммутировал бы со всеми операторами $W(g)$;
2) представление называется неприводимым, если в пространстве $\mathscr{E}$ не существует подпространства $\mathscr{E}_0$, инвариантного относительно действия операторов $W(g)$.

Легко построить представление группы вращений в пространстве состояний частицы $\mathscr{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$. Для этого определим операторы $W(g)$ формулой

$$W(g)\psi(\mathbf{x}) = \psi(g^{-1}\mathbf{x}). \tag{1}$$

Условие 1) определения представления очевидно, условие 2) проверяется следующим образом:

$$W(g_1g_2)\psi(\mathbf{x}) = \psi(g_2^{-1}g_1^{-1}\mathbf{x}) = W(g_1)\psi(g_2^{-1}\mathbf{x}) = W(g_1)W(g_2)\psi(\mathbf{x}).$$

Операторы $W(g)$ отображают $\mathscr{H}$ на $\mathscr{H}$ взаимно однозначно, поэтому для проверки унитарности достаточно убедиться, что они сохраняют норму вектора ψ:

$$\|W(g)\psi\|^2 = \int_{\mathbf{R}^3} |\psi(g^{-1}\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbf{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \|\psi\|^2,$$

где использовано равенство $\det g = 1$. Покажем, что справедлива формула

$$W(\mathbf{a}) = \exp[-i(L_1a_1 + L_2a_2 + L_3a_3)]. \tag{2}$$

Здесь мы обозначили $W(g(\mathbf{a}))$ через $W(\mathbf{a})$, L_1, L_2, L_3 — проекции момента импульса. Для доказательства формулы (2) рассмотрим сначала вращение вокруг третьей оси и покажем, что

$$W_3(\alpha) = e^{-iL_3\alpha}$$

или, что эквивалентно,

$$\psi(g_3^{-1}(\alpha)\mathbf{x}) = e^{-iL_3\alpha}\psi(\mathbf{x}) \tag{3}$$

при произвольной $\psi(\mathbf{x}) \in \mathscr{H}$. Мы проверим справедливость последнего равенства, если убедимся, что функции в левой и правой частях его удовлетворяют одному и тому же уравнению с одинаковыми начальными условиями.

Функция

$$\psi(\mathbf{x}, \alpha) = e^{-iL_3\alpha}\psi(\mathbf{x})$$

очевидно, удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, \alpha)}{\partial \alpha} = -iL_3\psi(\mathbf{x}, \alpha)$$

или подробнее

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, \alpha)}{\partial \alpha} = \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}\right)\psi(\mathbf{x}, \alpha). \qquad (4)$$

Функция, стоящая в левой части (3), которую мы обозначим через $\psi_1(\mathbf{x}, \alpha)$, имеет вид

$$\psi_1(\mathbf{x}, \alpha) = \psi(x_1 \cos\alpha + x_2 \sin\alpha,\ -x_1 \sin\alpha + x_2 \cos\alpha,\ x_3).$$

Проверим, что эта функция удовлетворяет уравнению (4):

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial \alpha} = \frac{\partial \psi}{\partial x_1}(-x_1 \sin\alpha + x_2 \cos\alpha) + \frac{\partial \psi}{\partial x_2}(-x_1 \cos\alpha - x_2 \sin\alpha),$$

$$x_2 \frac{\partial \psi_1}{\partial x_1} = x_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_1}\cos\alpha - x_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_2}\sin\alpha,$$

$$x_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial x_2} = x_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1}\sin\alpha + x_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_2}\cos\alpha,$$

откуда следует справедливость (4) для функции $\psi_1(\mathbf{x}, \alpha)$. Наконец, обе функции удовлетворяют одинаковому начальному условию

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \psi_1(\mathbf{x}, 0) = \psi(\mathbf{x}).$$

Таким образом, операторы вращений вокруг осей координат имеют вид

$$W_j(\alpha) = e^{-iL_j\alpha}, \qquad j = 1, 2, 3. \qquad (5)$$

Инфинитезимальные операторы представления сразу находятся из формулы (5)

$$\left.\frac{\partial W(\mathrm{a})}{\partial a_j}\right|_{\mathrm{a}=0} = \left.\frac{\partial W_j(\alpha)}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = -iL_j.$$

Далее, буквально повторяя рассуждения, которые привели нас к формуле (24.2), мы получим (2). Обратим внимание на то, что операторы $-iL_j$ имеют те же перестановочные соотношения, что и матрицы A_j, $j = 1, 2, 3$. Действительно, из

$$[L_1, L_2] = iL_3$$

следует, что

$$[-iL_1, -iL_2] = -iL_3.$$

В теории групп доказывается, что перестановочные соотношения между инфинитезимальными операторами представления не зависят от выбора представления. Более того, если какие-либо операторы в некотором пространстве $\mathscr{E}$ удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и инфинитезимальные образующие группы, то они являются инфинитезимальными операторами некоторого представления, действующего в $\mathscr{E}$.

Применительно к группе вращений это означает, что если мы найдем операторы M_1, M_2, M_3, удовлетворяющие соотношениям: $[M_1, M_2] = M_3$, $[M_2, M_3] = M_1$, $[M_3, M_1] = M_2$, то можем построить представление W по формуле

$$W(\mathbf{a}) = \exp(a_1M_1 + a_2M_2 + a_3M_3).$$

§ 26. Сферически-симметричные операторы

Оператор A называется сферически-симметричным, если он коммутирует со всеми операторами $W(g)$ представления группы вращений.

Очевидно, что оператор A является сферически-симметричным, если $[A, L_i] = 0$, $i = 1, 2, 3$.

Приведем примеры сферически-симметричных операторов.

1) Оператор умножения на функцию $f(r)$. В самом деле, мы видели, что операторы момента импульса действуют только на угловые переменные. Поэтому $L_i f(r)\psi(\mathbf{x}) = f(r)L_i\psi(\mathbf{x})$ при произвольной $\psi \in \mathscr{H}$.

2) Оператор L^2. Сферическая симметрия этого оператора следует из полученных ранее соотношений $[L^2, L_i] = 0$, $i = 1, 2, 3$.

3) Оператор кинетической энергии $T = -\frac{1}{2m}\Delta$. Сферическая симметрия этого оператора сразу видна в импульсном представлении, в котором он является оператором умножения на функцию $p^2/(2m)$. Операторы момента импульса L_i в импульсном представлении имеют точно такой же вид, как и в координатном.

4) Оператор Шредингера для частицы в центральном поле

$$H = -\frac{1}{2m}\Delta + V(r)$$

как сумма двух сферически-симметричных операторов.

Обратим внимание на то, что из самого существования сферически-симметричных операторов, отличных от CI, следует приводимость построенного представления группы вращений в пространстве состояний $\mathscr{H}$.

Выясним теперь особенности спектра оператора Шредингера в центральном поле, связанные с его сферической симметрией. Пусть ψ — некоторый собственный вектор, соответствующий

собственному значению E

$$H\psi = E\psi.$$

Тогда

$$HW(g)\psi = W(g)H\psi = EW(g)\psi,$$

откуда видно, что вектор $W(g)\psi$ тоже является собственным вектором H, соответствующим тому же собственному значению.

Мы видим, что собственное подпространство $\mathscr{H}_E$ оператора H, соответствующее собственному значению E, является инвариантным относительно вращений (т. е. относительно действия операторов $W(g)$). Представление W группы вращений в пространстве $\mathscr{H}$ индуцирует представление W_E в подпространстве $\mathscr{H}_E$ $g \to W_E(g)$, где $W_E(g)$ — ограничение оператора $W(g)$ на подпространство $\mathscr{H}_E$ (в дальнейшем мы будем пользоваться обозначением $W(g)$ и для операторов $W_E(g)$). Могут представиться два случая: либо представление, индуцированное в $\mathscr{H}_E$, является неприводимым, либо $\mathscr{H}_E$ содержит инвариантные относительно $W(g)$ подпространства меньшей размерности, и тогда это представление будет эквивалентно прямой сумме неприводимых представлений *.

Мы видим, что кратность собственного значения сферически-симметричного оператора Шредингера всегда не меньше размерности некоторого неприводимого представления группы вращений и в первом из упомянутых случаев совпадает с этой размерностью.

Появление кратных собственных значений энергии в физике называют вырождением, а такие энергетические уровни вырожденными. Если в каждом из собственных подпространств индуцированное представление неприводимо, то говорят, что оператор H не имеет случайных вырождений. В этом случае кратность спектра полностью объясняется выбранной симметрией задачи. При наличии случайных вырождений, возможно, существует более богатая группа симметрии уравнения Шредингера. Именно так обстоит дело с оператором Шредингера для атома водорода, который, как мы увидим, имеет случайные вырождения относительно группы вращений.

Заметим, что у сферически-симметричного оператора H с чисто точечным спектром существуют собственные значения сколь угодно большой кратности. Действительно, в этом случае $\mathscr{H}$ представимо в виде

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{E_1} \oplus \mathscr{H}_{E_2} \oplus \ldots,$$

---

* Здесь мы используем известную из теории групп теорему:

Пусть задано унитарное представление $g \to W(g)$ группы вращений в гильбертовом пространстве $\mathscr{E}$. Тогда существуют конечномерные подпространства $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \ldots$, инвариантные относительно $W(g)$, в каждом из которых представление W неприводимо. Эти подпространства попарно ортогональны, и их сумма есть все $\mathscr{E}$, т. е. $\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \oplus \mathscr{E}_2 \oplus \ldots$.

С другой стороны,

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \oplus \mathscr{H}_2 \oplus \ldots,$$

где через $\mathscr{H}_n$ обозначены подпространства, в которых действуют неприводимые представления группы вращений. Изучая такие представления в § 30, мы увидим, что среди $\mathscr{H}_n$ имеются подпространства сколь угодно большой размерности. Но для любого $\mathscr{H}_n$ хотя бы одно из пересечений $\mathscr{H}_n \cap \mathscr{H}_{E_k} \neq \varnothing$ и тогда содержит $\mathscr{H}_n$ целиком, поэтому собственное значение E_k имеет кратность не меньшую, чем размерность * $\mathscr{H}_n$.

Если система не имеет случайных вырождений, то собственные значения оператора H можно классифицировать с помощью неприводимых представлений группы G в том смысле, что каждое собственное подпространство $\mathscr{H}_E$ является и собственным подпространством соответствующего представления. Поэтому важной представляется задача о нахождении всех неприводимых представлений группы вращений. Этим вопросом мы займемся в следующих параграфах.

В заключение этого параграфа заметим, что такую сравнительно простую задачу квантовой механики, как задача о движении в центральном поле, можно было бы решать вообще не привлекая теории групп. Наша цель на этом примере показать, как применяется теория групп при решении квантовомеханических задач. Микромир (атомы, молекулы, кристаллические решетки) весьма богат различными видами симметрии. Теория представлений групп позволяет с самого начала явно учесть эти свойства симметрии, и зачастую только подход, основанный на теории групп, позволяет получать важные результаты для очень сложных систем.

---

* Очень простым примером сферически-симметричного оператора с чисто точечным спектром является оператор Шредингера для трехмерного гармонического осциллятора

$$H = \frac{P_1^2 + P_2^2 + P_3^2}{2} + \frac{\omega^2 \left(Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2\right)}{2}$$

или в координатном представлении

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{\omega^2}{2} r^2.$$

Задача разделением переменных сводится к одномерному случаю и для собственных значений получается формула

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\omega, \quad n_1,\ n_2,\ n_3 = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

Каждой тройке чисел n_1, n_2, n_3 соответствует собственный вектор $\psi_{n_1 n_2 n_3}$. Видно, что кратность собственных значений E при $E \to \infty$ растет неограниченно.

§ 27. Представление вращений унитарными матрицами второго порядка

Мы построим представление группы вращений G, действующее в пространстве $\mathbf{C}^2$. Для этого введем три самосопряженные матрицы со следом, равным нулю,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эти матрицы называются матрицами Паули. Вычислим перестановочные соотношения для этих матриц:

$$[\sigma_1, \sigma_2] = \sigma_1\sigma_2 - \sigma_2\sigma_1 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

т. е. $[\sigma_1, \sigma_2] = 2i\sigma_3$. Аналогично проверяется, что

$$[\sigma_2, \sigma_3] = 2i\sigma_1, \qquad [\sigma_3, \sigma_1] = 2i\sigma_2.$$

Нетрудно видеть, что матрицы $-i\sigma_j/2$, $j = 1, 2, 3$ имеют перестановочные соотношения такие же, как инфинитезимальные образующие группы вращения A_j:

$$\left[-\frac{i\sigma_1}{2}, -\frac{i\sigma_2}{2}\right] = -\frac{i\sigma_3}{2}.$$

Поэтому можно построить представление $g \to U(g)$:

$$U(g) = \exp\left[-\frac{i}{2}(\sigma_1 a_1 + \sigma_2 a_2 + \sigma_3 a_3)\right]. \tag{1}$$

Следует отметить, что это представление не является представлением в обычном смысле слова, так как вместо

$$U(g_1)U(g_2) = U(g_1 g_2) \tag{2}$$

мы будем иметь

$$U(g_1)U(g_2) = \sigma U(g_1 g_2), \tag{3}$$

где $\sigma = \pm 1$. В этом нетрудно убедиться на простом примере, сосчитав произведение $U(g_1)U(g_2)$, где $g_1 = g_2$ есть вращение на угол π вокруг оси x_3

$$U(g_1)U(g_2) = e^{-\frac{i}{2}\sigma_3\pi} e^{-\frac{i}{2}\sigma_3\pi} = e^{-i\sigma_3\pi} = \begin{pmatrix} e^{-i\pi} & 0 \\ 0 & e^{i\pi} \end{pmatrix} = -I.$$

В то же время по формуле (1) единичному элементу группы соответствует $U(0, 0, 0) = I$. Отображение $g \to U(g)$, удовлетворяющее (3) при $|\sigma| = 1$, называется проективным представлением с мультипликатором. Если мы все-таки захотим сохранить (2), то должны будем считать, что каждому вращению соответствует две матрицы U, отличающиеся знаком. В физике такого рода представления называют двузначными. Эти представления играют в квантовой механике такую же важную роль, как и обычные. В дальнейшем мы не будем подчеркивать это различие. Заметим еще, что появление такого рода представлений объясняется тем, что группа вращений неодносвязна.

Выясним свойства матриц $U(g)$. Унитарность этих матриц очевидна, так как σ_i — самосопряженные матрицы. Нетрудно

видеть, что определитель этих матриц равен единице. Действительно, $U(g)$ имеет вид e^{iS}, где S — самосопряженная матрица со следом, равным нулю. Эту матрицу всегда можно привести к диагональному виду подобным преобразованием и она примет вид $\begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & -\lambda \end{pmatrix}$. Соответственно диагональный вид матрицы будет $\begin{pmatrix} e^{i\lambda} & 0 \\ 0 & e^{-i\lambda} \end{pmatrix}$. След и определитель инвариантны относительно подобного преобразования, поэтому $\det U(g) = 1$.

Найдем общий вид унитарных матриц с определителем, равным единице. Запишем условие унитарности:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{a} & \bar{c} \\ \bar{b} & \bar{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\bar{a} + b\bar{b} & a\bar{c} + b\bar{d} \\ c\bar{a} + d\bar{b} & c\bar{c} + d\bar{d} \end{pmatrix} = I.$$

Из равенства $c\bar{a} + d\bar{b} = 0$ находим, что $d = -\frac{c\bar{a}}{\bar{b}}$. Из условий $\det U = 1$ и $a\bar{a} + b\bar{b} = 1$ получим

$$ad - bc = -\frac{a\bar{a}c}{\bar{b}} - bc = -\frac{c}{\bar{b}}(a\bar{a} + b\bar{b}) = -\frac{c}{\bar{b}} = 1,$$

т. е. $$c = -\bar{b}, \qquad d = \bar{a}.$$

Таким образом, унитарные матрицы с определителем, равным единице, имеют вид

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -\bar{b} & \bar{a} \end{pmatrix}, \qquad |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Группа таких матриц называется группой $SU(2)$.

§ 28. Представление группы вращений в пространстве целых аналитических функций двух комплексных переменных

В этом параграфе построим все неприводимые представления группы вращений. В качестве пространства представлений мы выберем гильбертово пространство $\mathcal{D}_2$ функций $f(\xi, \eta)$ $(\xi \in \mathbf{C}, \eta \in \mathbf{C})$ вида

$$f(\xi, \eta) = \sum_{n_1, n_2 = 0}^{\infty} C_{n_1} C_{n_2} \frac{\xi^{n_1}\eta^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}}, \qquad \sum_{n_1, n_2} |C_{n_1 n_2}|^2 < \infty$$

со скалярным произведением

$$(f, g) = \frac{1}{\pi^2} \int f(\xi, \eta) \overline{g(\xi, \eta)} e^{-|\xi|^2 - |\eta|^2} d\mu(\xi)\, d\mu(\eta).$$

Точно так же, как в § 19, проверяется, что функции $f_{n_1 n_2} = \frac{\xi^{n_1}\eta^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}}$ образуют ортонормированный базис в этом пространстве $\left(f_{n_1 n_2}, f_{n_1' n_2'}\right) = \delta_{n_1 n_1'}\delta_{n_2 n_2'}$. Учитывая связь между группами $SO(3)$ и $SU(2)$, мы можем строить представление группы $SU(2)$. В дальнейшем удобно $f(\xi, \eta)$ обозначать через $f(\zeta)$, где $\zeta = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^2$. Отображение $U \to W(U)$ определим формулой

$$W(U) f(\zeta) = f\left(U^{-1}\zeta\right). \tag{1}$$

Мы будем эти операторы обозначать также через $W(\mathbf{a})$ или $W(g)$, а операторы вращений вокруг осей через $W_j(\alpha)$, $j = 1, 2, 3$.

Чтобы получить выражение для $W(g)$, найдем инфинитезимальные операторы представления, которые обозначим через $-iM_j$, $j = 1, 2, 3$

$$-iM_1 f(\zeta) = \frac{\partial}{\partial a_1} W(\mathbf{a})\big|_{\mathbf{a}=0} f(\zeta) = \frac{dW_1(\alpha)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} f(\zeta) =$$

$$= \frac{d}{d\alpha} f\left(U_1^{-1}(\alpha)\zeta\right)\big|_{\alpha=0} = \frac{d}{d\alpha} f\left(e^{\frac{i}{2}\sigma_1\alpha}\zeta\right)\bigg|_{\alpha=0} =$$

$$= \frac{\partial f}{\partial \xi}\frac{d\xi(\alpha)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} + \frac{\partial f}{\partial \eta}\frac{d\eta(\alpha)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0}.$$

Здесь мы использовали определение (1) и через $\xi(\alpha)$, $\eta(\alpha)$ обозначили составляющие вектора $e^{\frac{i}{2}\sigma_1\alpha}\zeta$. Последние производные вычисляются так:

$$\frac{d}{d\alpha} e^{i\frac{\sigma_1}{2}\alpha}\zeta\bigg|_{\alpha=0} = \frac{i}{2}\sigma_1 e^{\frac{i}{2}\sigma_1\alpha}\zeta\bigg|_{\alpha=0} = \frac{i}{2}\sigma_1\zeta = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} \eta \\ \zeta \end{pmatrix},$$

поэтому

$$\frac{d\xi(\alpha)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} = \frac{i}{2}\eta, \quad \frac{d\eta(\alpha)}{d\alpha}\bigg|_{\alpha=0} = \frac{i}{2}\xi.$$

В результате получим

$$-iM_1 f(\zeta) = \frac{i}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial \xi}\eta + \frac{\partial f}{\partial \eta}\xi\right).$$

Точно так же находятся операторы M_2 и M_3. Выпишем выражения для этих операторов:

$$\begin{aligned} M_1 &= -\frac{1}{2}\left(\eta\frac{\partial}{\partial \xi} + \xi\frac{\partial}{\partial \eta}\right), \\ M_2 &= -\frac{i}{2}\left(-\eta\frac{\partial}{\partial \xi} + \xi\frac{\partial}{\partial \eta}\right), \\ M_3 &= -\frac{1}{2}\left(\xi\frac{\partial}{\partial \xi} - \eta\frac{\partial}{\partial \eta}\right). \end{aligned} \tag{2}$$

Легко проверить, что операторы M_j имеют такие же перестановочные соотношения, как операторы момента импульса, а $-iM_j$, $j=1, 2, 3$ — как матрицы A_1, A_2, A_3. Для операторов $W(\mathbf{a})$ получим

$$W(\mathbf{a}) = \exp[-i(M_1 a_1 + M_2 a_2 + M_3 a_3)]. \tag{3}$$

Основное удобство пространства представления $\mathscr{D}_2$ состоит в том, что оно очень легко раскладывается в прямую сумму инвариантных подпространств, в которых действуют неприводимые представления. Действительно, инвариантность некоторого подпространства относительно операторов $W(\mathbf{a})$ эквивалентна инвариантности относительно действия операторов M_1, M_2, M_3. Из формул (2) видно, что такими инвариантными подпространствами являются подпространства однородных многочленов степени $n = n_1 + n_2$. Эти подпространства имеют размерность $n+1$, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Нам осталось показать, что такие подпространства не содержат инвариантных подпространств меньшей размерности. Для этого введем операторы

$$\begin{aligned} M_+ &= M_1 + iM_2 = -\eta \frac{\partial}{\partial \xi}, \\ M_- &= M_1 - iM_2 = -\xi \frac{\partial}{\partial \eta} \end{aligned} \tag{4}$$

и посмотрим, как они действуют на базисные векторы $f_{n_1 n_2}$,

$$M_+ f_{n_1 n_2} = -\eta \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\xi^{n_1}\eta^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} = -n_1 \frac{\xi^{n_1-1}\eta^{n_2+1}}{\sqrt{n_1! n_2!}} = \\ = -\sqrt{n_1(n_2+1)} \frac{\xi^{n_1-1}\eta^{n_2+1}}{\sqrt{(n_1-1)!(n_2+1)!}},$$

$$\begin{aligned} \text{т. е. } M_+ f_{n_1 n_2} &= -\sqrt{n_1(n_2+1)}\, f_{n_1-1,\, n_2+1}, \\ M_- f_{n_1 n_2} &= -\sqrt{(n_1+1)n_2}\, f_{n_1+1,\, n_2-1}. \end{aligned} \tag{5}$$

Очевидно, что

$$M_+ f_{on} = 0, \quad M_- f_{no} = 0.$$

Из формул (5) ясно, что подпространства однородных многочленов не содержат инвариантных подпространств меньшей размерности.

Покажем, что базисные векторы являются собственными векторами оператора M_3 и оператора $M^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2$. Имеем

$$M_3 f_{n_1 n_2} = -\frac{1}{2}\left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial}{\partial \eta}\right) \frac{\xi^{n_1}\eta^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} = -\frac{1}{2}(n_1 - n_2) \frac{\xi^{n_1}\eta^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}},$$

$$\text{т. е. } M_3 f_{n_1 n_2} = -\frac{1}{2}(n_1 - n_2) f_{n_1 n_2}. \tag{6}$$

Для оператора M^2 справедлива формула

$$M^2 = M_+ M_- + M_3^2 - M_3.$$

Действительно,

$$M_+M_- = (M_1 + iM_2)(M_1 - iM_2) = M_1^2 + M_2^2 - i(M_1M_2 - M_2M_1) =$$
$$= M^2 - M_3^2 + M_3.$$

Далее имеем

$$M^2 f_{n_1n_2} = (M_+M_- + M_3^2 - M_3) f_{n_1n_2} =$$
$$= \left(\sqrt{(n_1+1)n_2}\sqrt{n_2(n_1+1)} + \frac{1}{4}(n_1-n_2)^2 + \frac{1}{2}(n_1-n_2)\right) f_{n_1n_2},$$
$$M^2 f_{n_1n_2} = \left(\frac{1}{4}(n_1+n_2)^2 + \frac{1}{2}(n_1+n_2)\right) f_{n_1n_2}. \qquad (7)$$

Удобно переписать все полученные соотношения, заменив значки n_1, n_2 на j, m по формулам

$$j = \frac{n_1+n_2}{2}, \quad m = -\frac{1}{2}(n_1-n_2), \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots,$$
$$m = -j, -j+1, \ldots, j,$$

или

$$n_1 = j - m, \; n_2 = j + m.$$

Тогда формулы (5)—(7) принимают вид

$$M_+ f_{jm} = -\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\, f_{j,m+1}, \qquad (8)$$
$$M_- f_{jm} = -\sqrt{(j-m+1)(j+m)}\, f_{j,m-1}, \qquad (9)$$
$$M_3 f_{jm} = m f_{jm}, \qquad (10)$$
$$M^2 f_{jm} = j(j+1) f_{jm}, \qquad (11)$$

где через f_{jm} обозначена $f_{n_1n_2} = f_{j-m,\, j+m}$.

Новые значки j и m удобны тем, что каждому индексу j соответствует представление размерности $2j+1$, $j = 0$, $1/2$, 1, $3/2$, ... Такое представление обычно обозначают через D_j, а j называют индексом представления. Формулы (8)—(10) позволяют легко построить явный вид матриц M_1, M_2, M_3 для каждого D_j. Таким образом, мы построили конечномерные представления D_j группы вращений всех размерностей.

§ 29. Единственность представлений D_j

Докажем, что построенные неприводимые представления D_j единственны (с точностью до эквивалентности). При доказательстве мы увидим, в какой степени спектр операторов момента импульса определяется их перестановочными соотношениями и как произвольное представление группы вращений раскладывается на неприводимые.

Пусть в n-мерном пространстве $\mathscr{E}$ определено некоторое неприводимое представление, через $-iJ_1$, $-iJ_2$, $-iJ_3$ обозначим

инфинитезимальные операторы этого представления. Они удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[J_1, J_2] = iJ_3,$$
$$[J_2, J_3] = iJ_1,$$
$$[J_3, J_1] = iJ_2.$$

Эквивалентность этого представления некоторому представлению D_j будет доказана, если мы покажем, что при подходящем выборе базиса в $\mathscr{E}$ матрицы J_k, $k = 1, 2, 3$ совпадают с матрицами M_k. Прежде всего заметим, что представление группы вращений одновременно является и представлением ее подгруппы, состоящей из вращений вокруг оси x_3 на угол α. Эта подгруппа абелева, поэтому все ее неприводимые представления одномерны и имеют вид $e^{-im_k\alpha}$ (относительно чисел m_k мы не будем делать никаких предположений, допуская возможность «многозначных» представлений). Это значит, что при подходящем выборе базиса в $\mathscr{E}$ матрица вращения вокруг оси x_3 имеет вид

$$e^{-iJ_3\alpha} = \begin{pmatrix} e^{-im_1\alpha} & 0 & \cdot\, 0 \\ 0 & e^{-im_2\alpha} & \vdots\, 0 \\ \cdots & \cdots & \vdots \\ & & \vdots \\ 0 & 0 \ldots & e^{-im_n\alpha} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, в $\mathscr{E}$ существует базис из собственных векторов оператора J_3,

$$J_3 e_m = m e_m. \tag{1}$$

Далее, из неприводимости представления следует, что оператор $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$, коммутирующий со всеми J_k, $k = 1, 2, 3$, должен быть кратен единичному в пространстве $\mathscr{E}$. Это возможно, если все базисные векторы e_m являются собственными векторами оператора J^2, соответствующими одному и тому же собственному значению, которое мы обозначим через $j(j+1)$ (эта запись пока просто обозначение). Базисные векторы будем обозначать через e_{jm},

$$J^2 e_{jm} = j(j+1)\, e_{jm}. \tag{2}$$

Введем операторы $J_\pm = J_1 \pm iJ_2$. Легко проверить справедливость следующих формул:

$$[J^2, J_\pm] = 0, \tag{3}$$

$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm, \tag{4}$$

$$J^2 = J_\pm J_\mp + J_3^2 \mp J_3. \tag{5}$$

Найдем границу возможных значений $|m|$ при заданном собственном значении $j(j+1)$. Для этого, умножая на e_{jm} равенство

$$\left(J_1^2 + J_2^2\right) e_{jm} = \left(j(j+1) - m^2\right) e_{jm},$$

получим

$$\left(\left(J_1^2 + J_2^2\right) e_{jm}, e_{jm}\right) = j(j+1) - m^2.$$

Левая часть неотрицательна, поэтому

$$|m| \leqslant \sqrt{j(j+1)}. \tag{6}$$

Из соотношений (3) и (4) следует, что

$$J^2 J_\pm e_{jm} = j(j+1) J_\pm e_{jm}, \; J_3 J_\pm e_{jm} = (m \pm 1) J_\pm e_{jm}.$$

Поэтому векторы $J_\pm e_{jm}$ (если они ненулевые) являются собственными векторами оператора J^2 с собственным значением $j(j+1)$ и оператора J_3 с собственными значениями $m \pm 1$. Таким образом по произвольному базисному элементу e_{jm} может быть построена цепочка собственных векторов с одним и тем же собственным значением оператора J^2 и с собственными значениями m_1, $m_1 + 1$, ..., m_2 оператора J_3. Через m_1 и m_2 мы обозначили наименьшее и наибольшее собственные значения соответственно. Существование m_1 и m_2 следует из неравенства (6), цепочка собственных векторов должна обрываться в обе стороны.

Вычислим норму вектора $J_\pm e_{jm}$, учитывая, что $\| e_{jm} \| = 1$ и что $J_\pm^* = J_\mp$,

$$\| J_\pm e_{jm} \|^2 = (J_\mp J_\pm e_{jm}, e_{jm}) = \left(\left(J^2 - J_3^2 \mp J_3\right) e_{jm}, e_{jm}\right) =$$
$$= j(j+1) - m(m \pm 1) = (j \mp m)(j \pm m + 1).$$

Поэтому мы можем написать

$$J_\pm e_{jm} = -\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\, e_{j,\, m\pm 1}. \tag{7}$$

Эта формула позволяет по произвольному орту e_{jm} строить новые орты $e_{j,\,m\pm 1}$, удовлетворяющие всем требованиям. Знак минус перед корнем написан из соображений удобства.

Мы пока еще не выяснили, какие значения могут принимать числа j и m. Будем исходить из равенств

$$J_- e_{jm_1} = 0, \quad J_+ e_{jm_2} = 0. \tag{8}$$

Умножая эти равенства на J_+ и на J_- и используя (5), получим

$$(J^2 - J_3^2 + J_3) e_{jm_1} = 0, \; (J^2 - J_3^2 - J_3) e_{jm_2} = 0,$$

или

$$j(j+1) - m_1^2 + m_1 = 0,$$
$$j(j+1) - m_2^2 - m_2 = 0. \tag{9}$$

Из (9) сразу получаем $(m_1 + m_2)(m_1 - m_2 - 1) = 0$. Нам го-

дится одно решение этого уравнения $m_1 = -m_2$, так как $m_2 \geqslant m_1$. Далее $m_2 - m_1 = 2m_2$ — число целое или нуль. Поэтому m_2 может принимать значения 0, 1/2, 1, 3/2, ... Наконец, из (9) мы видим, что в качестве числа j можно взять m_2. Мы получили, что собственные значения оператора J^2 имеют вид $j(j+1)$, где $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$, а собственные числа m оператора J_3 при заданном j пробегают $(2j+1)$ значение: $-j, -j+1, \ldots, j-1, j$. Числа j и m одновременно являются либо целыми, либо полуцелыми. Еще раз подчеркнем, что эти свойства спектра операторов J^2 и J мы нашли, используя только перестановочные соотношения.

Для завершения доказательства нам осталось убедиться в том, что построенные собственные векторы образуют базис в $\mathscr{E}$. Это следует из неприводимости представления. Действительно, подпространство $\mathscr{E}'$, натянутое на векторы e_{jm}, $m = -j, -j+1, \ldots, j$, будет инвариантным относительно операторов J_k, $k = 1, 2, 3$, а потому должно совпадать с $\mathscr{E}$, и размерность представления $n = 2j+1$. Формулы (1) и (7) показывают, что матрицы J_k при таком выборе базиса совпадают с матрицами M_k.

Заметим, что мы заодно построили способ разложения произвольного представления на неприводимые. Пусть в некотором пространстве $\mathscr{E}$ действует представление группы вращений $-iJ_k$ и его инфинитезимальные операторы. Для того чтобы выделить инвариантные подпространства, мы должны найти общие решения уравнений

$$J^2 e_{jm} = j(j+1)\, e_{jm},\ J_3 e_{jm} = m e_{jm}. \tag{10}$$

Векторы e_{jm} при заданном j и $m = -j, -j+1, \ldots, j$ образуют базис неприводимого представления размерами $2j+1$. Задача о нахождении общих решений уравнений (10) проще всего решается следующим образом. Сначала находится вектор e_{jj}, удовлетворяющий уравнениям

$$J_+ e_{jj} = 0,\ J_3 e_{jj} = j e_j,$$

а затем для построения векторов e_{jm} используется формула

$$J_- e_{jm} = -\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, e_{j,\,m-1},$$

которая позволяет по e_{jj} последовательно найти все векторы e_{jm}.

§ 30. Представления группы вращений в пространстве $\mathbf{L}^2(\mathbf{S}^2)$. Сферические функции

В § 25 мы построили представление группы вращений в пространстве состояний $\mathscr{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$ операторами

$$W(\mathbf{a}) = \exp[-i(L_1 a_1 + L_2 a_2 + L_3 a_3)],$$

где L_1, L_2, L_3 — операторы момента импульса. Напомним, что эти операторы действуют только на угловые переменные функции $\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbf{R}^3)$, поэтому пространство $L^2(\mathbf{R}^3)$ удобно рассматривать как $L^2(\mathbf{R}^+) \otimes L^2(S^2)$. Здесь $L^2(\mathbf{R}^+)$ — пространство квадратично интегрируемых функций $f(r)$ с весом r^2 на $\mathbf{R}^+$, а $L^2(S^2)$ — пространство функций $\psi(\mathbf{n}) = \psi(\theta, \varphi)$, квадратично интегрируемых на единичной сфере. Скалярные произведения в этих пространствах вводятся формулами

$$(f_1, f_2) = \int_0^\infty r^2 f_1(r) \overline{f_2(r)}\, dr, \quad (\psi_1, \psi_2) = \int_{S^2} \psi_1(\mathbf{n}) \psi_2(\mathbf{n})\, d\mathbf{n},$$

где $d\mathbf{n} = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ — элемент поверхности единичной сферы.

Несколько громоздкие вычисления приводят к следующему виду операторов момента импульса в сферических координатах:

$$L_1 = i\left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$L_2 = -i\left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$L_3 = -i \frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

Операторы $L_\pm = L_1 \pm iL_2$ в этих переменных имеют вид

$$L_+ = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \quad L_- = e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Общие собственные функции операторов L^2 и L_3 будем обозначать через $Y_{lm}(\mathbf{n})$ (число j для операторов L принято обозначать через l). Уравнения $L_+ Y_{ll} = 0$ и $L_3 Y_{ll} = lY_{ll}$ в сферических координатах имеют вид

$$-i \frac{\partial Y_{ll}}{\partial\varphi} = lY_{ll}, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial Y_{ll}}{\partial\theta} + i\operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{ll} = 0.$$

Из первого уравнения (1) видим, что

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = e^{il\varphi} F_{ll}(\theta),$$

причем l может принимать только целые значения, $l = 0, 1, 2, \ldots$ Второе уравнение (1) позволяет получить уравнение для $F_{ll}(\theta)$

$$\frac{\partial F_{ll}(\theta)}{d\theta} - l\operatorname{ctg}\theta F_{ll}(\theta) = 0. \qquad (2)$$

Решая это уравнение, получим

$$F_{ll}(\theta) = C \sin^l\theta.$$

Заметим, что для каждого l существует одно решение уравнения (2). Итак, мы нашли, что

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = C \sin^l \theta e^{il\varphi},$$

причем постоянная C может быть найдена из условия нормировки. Остальные функции $Y_{lm}(\mathbf{n})$ могут быть вычислены по формуле

$$Y_{l,\,m-1} = -\frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) Y_{lm}.$$

Мы не будем проделывать соответствующих вычислений. Функции $Y_{lm}(\mathbf{n})$ называют нормированными сферическими функциями l-го порядка. Для них может быть получено выражение

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta),$$

где функции

$$P_l^m(\mu) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \frac{1}{2^l l!} \left(1-\mu^2\right)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}(\mu^2-1)^l}{d\mu^{l-m}}$$

носят название нормированных присоединенных полиномов Лежандра.

Итак, базис неприводимого представления в пространстве $L^2(S^2)$ состоит из сферических функций $Y_{lm}(\mathbf{n})$ при фиксированном l и $m = -l, -l+1, \ldots, l$. Пространство $L^2(S^2)$ содержит подпространства неприводимых представлений всех нечетных размерностей $2l+1$ (l — целое) по одному разу. Теорема о разложении представления группы вращений на неприводимые в данном случае эквивалентна утверждению о полноте сферических функций в $L^2(S^2)$. Любая функция $\psi(\mathbf{n}) \in L^2(S^2)$ может быть разложена в сходящийся ряд

$$\psi(\mathbf{n}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} Y_{lm}(\mathbf{n}). \tag{3}$$

Вспомним, что в пространстве $\mathcal{D}_2$ действовали неприводимые представления как четных, так и нечетных размерностей. Пространство $\mathcal{D}_2$ можно представить в виде прямой суммы $\mathcal{D}_2^+ \oplus \mathcal{D}_2^-$, где $\mathcal{D}_2^+$ и $\mathcal{D}_2^-$ — ортогональные подпространства четных и нечетных функций соответственно. В $\mathcal{D}_2^+$, как и в $L^2(S^2)$, действуют представления только нечетных размерностей. Любой элемент $f(z) \in \mathcal{D}_2^+$ может быть представлен в виде

$$f(z) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} \frac{\xi^{l-m}\eta^{l+m}}{\sqrt{(l-m)!(l+m)!}}. \tag{4}$$

Ясно, что взаимно-однозначное соответствие

$$f(z) \longleftrightarrow \psi(\mathbf{n})$$

устанавливает изоморфизм между пространствами $\mathscr{D}_2^+$ и $L^2(S^2)$, при котором

$$\frac{\xi^{l-m}\eta^{l+m}}{\sqrt{(l-m)!(l+m)!}} \longleftrightarrow Y_{lm}(\mathbf{n}),$$

$$M_k \longleftrightarrow L_k,\ k=1,\ 2,\ 3.$$

В заключение этого параграфа рассмотрим представление группы вращений в пространстве состояний $L^2(\mathbf{R}^3)=L^2(S^2)\otimes\otimes L^2(\mathbf{R}^+)$. Пусть $\{f_n(r)\}$ — произвольный базис в $L^2(\mathbf{R}^+)$. Тогда $\{f_n(r)Y_{lm}(\mathbf{n})\}$ — базис в пространстве $L^2(\mathbf{R}^3)$, и любая функция $\psi(\mathbf{x})\in L^2(\mathbf{R}^3)$ может быть разложена в ряд

$$\psi(\mathbf{x})=\sum_n\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}C_{nlm}f_n(r)Y_{lm}(\theta,\ \varphi).$$

Из этой формулы видно, что $L^2(\mathbf{R}^3)$ также может быть разложено (причем многими способами) на подпространства, в которых действуют неприводимые представления группы вращений порядка $(2l+1)$, и каждое представление D_l встречается бесконечное число раз. Любое из инвариантных подпространств, в которых действует неприводимое представление D_l, есть множество функций вида $f(r)\sum_{m=-l}^{l}C_mY_{lm}(\theta,\ \varphi)$, где $f(r)\in L^2(\mathbf{R}^+)$.

§ 31. Радиальное уравнение Шредингера

Вернемся к изучению задачи о движении частицы в центральном поле. Будем искать решения уравнения

$$-\frac{1}{2\mu}\Delta\psi+V(r)\psi=E\psi$$

или, используя формулу (23.5),

$$-\frac{1}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{L^2}{2\mu r^2}\psi+V(r)\psi=E\psi. \qquad (1)$$

Мы видели, что собственные подпространства оператора Шредингера H в случае отсутствия случайных вырождений должны совпадать с подпространствами неприводимых представлений D_l, а при наличии случайных вырождений являться прямой суммой таких подпространств. Ясно, что все независимые собственные функции оператора H можно построить, если мы будем искать их в виде

$$\psi(r,\ \mathbf{n})=R_l(r)Y_{lm}(\mathbf{n}). \qquad (2)$$

Эти функции уже являются собственными функциями операторов L^2 и L_3

$$L^2\psi=l(l+1)\psi,\ L_3\psi=m\psi,$$

а потому описывают состояния частицы с определенными значениями квадрата момента импульса и его третьей проекции.

Подстановка (2) в (1) дает нам уравнение для $R_l(r)$

$$-\frac{1}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{dR_l(r)}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}R_l(r)+V(r)R_l(r)=ER_l(r).$$

Введем новую неизвестную функцию

$$R_l(r)=\frac{f_l(r)}{r},$$

и уравнение для $f_l(r)$ примет вид

$$-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2f_l}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}f_l+V(r)f_l=Ef_l. \qquad (3)$$

Это уравнение носит название радиального уравнения Шредингера. Обратим внимание на некоторые особенности уравнения (3). Прежде всего параметр m не входит в уравнение, физически это означает, что энергия частицы не зависит от проекции момента на ось x_3. Для каждого l получается свое радиальное уравнение. Спектр радиального уравнения всегда простой (это можно доказать), поэтому случайные вырождения возможны, если уравнения (3) с разными l имеют одинаковые собственные значения.

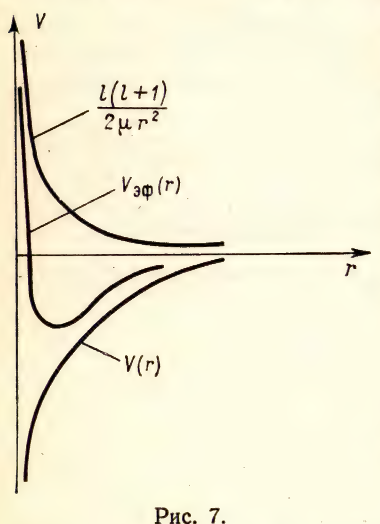


Рис. 7.

Радиальное уравнение по виду совпадает с уравнением Шредингера для одномерной частицы

$$-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi,$$

если ввести так называемый эффективный потенциал

$$V_{эф}(r)=V(r)+\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}. \qquad (4)$$

Есть, однако, одно существенное отличие. Функция $\psi(x)$ определена на $\mathbf{R}$, а $f_l(r)$ на $\mathbf{R}^+$, поэтому радиальное уравнение эквивалентно одномерному уравнению Шредингера для задачи с потенциалом $V(x)$ при условии, что $V(x)=\infty$ при $x<0$.

На рис. 7 изображены графики функций $V(r)$, $l(l+1)/(2\mu r^2)$ и $V_{эф}(r)$. В качестве $V(r)$ взят кулоновский потенциал притяжения $-\alpha/r$ $(\alpha>0)$.

Выражение $l(l+1)/(2\mu r^2)$ может быть истолковано как потенциал отталкивания, возникающий за счет центробежной силы. Поэтому это выражение обычно называют центробежным потенциалом.

В квантовой механике приходится решать задачи с самыми различными потенциалами $V(r)$. Наиболее важными из них, по-видимому, являются кулоновский потенциал $V(r)=\alpha/r$, описывающий взаимодействие заряженных частиц, и потенциал Юкавы $V(r)=g\frac{e^{-\mu r}}{r}$, который часто используется в ядерной физике.

Обычно рассматриваются потенциалы, которые при $r\to 0$ менее сингулярны, чем $1/r^{2-\varepsilon}$ $(\varepsilon>0)$. В зависимости от поведения при $r\to\infty$ убывающие $(V(r)\to 0)$ потенциалы делятся на короткодействующие $V(r)=o\ (1/r^{2+\varepsilon})$, $\varepsilon>0$ и дальнодействующие, которые этому условию не удовлетворяют. Потенциал Юкавы является короткодействующим потенциалом, а кулоновский потенциал — дальнодействующим. Спектр радиального оператора Шредингера

$$H_l=-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\ \left(\mu=\frac{1}{2}\right)$$

хорошо изучен для весьма широкого класса потенциалов. В случае растущего потенциала $V(r)\to\infty$ при $r\to\infty$ спектр чисто точечный простой. В случае убывающего потенциала интервал $0<E<\infty$ заполнен непрерывным спектром, отрицательный спектр дискретный. Для короткодействующего потенциала положительный спектр простой, непрерывный, а отрицательный состоит из конечного числа собственных значений.

Приведем простые соображения, позволяющие понять основные особенности спектра H_l. Для этого посмотрим, как ведут себя решения радиального уравнения при $r\to 0$ и $r\to\infty$. Если при $r\to\infty$ пренебречь членом $V_{эф}$ в радиальном уравнении, то оно сведется к

$$-\frac{1}{2\mu}f_l''+Ef_l=0.$$

При $E>0$ это уравнение имеет два линейно-независимых решения e^{-ikr} и e^{ikr}, $k^2=2\mu E>0$, $k>0$. При $E<0$ линейно-независимые решения имеют вид $e^{-\varkappa r}$ и $e^{\varkappa r}$, $\varkappa^2=-2\mu E>0$, $\varkappa>0$.

В случае $r\to 0$ можно надеяться, что мы получим правильное поведение решений радиального уравнения, если в этом уравнении из членов линейных по f_l оставим наиболее сингулярный $\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}f_l$, тогда

$$f_l''-\frac{l(l+1)}{r^2}f_l=0.$$

Это уравнение имеет два линейно-независимых решения r^{-l} и r^{l+1}.

Теперь посмотрим, какие условия разумно наложить на решения радиального уравнения. Нас интересуют решения уравнения

Шредингера $\psi(\mathbf{x})=\frac{f_l(r)}{r}Y_{l_m}(\mathbf{n})$. Функции $\psi(\mathbf{x})$ должны быть непрерывными в $\mathbf{R}^3$ и либо квадратично интегрируемыми, либо ограниченными во всем пространстве. В первом случае они являются собственными функциями в обычном смысле слова, а во втором — с их помощью может быть описан непрерывный спектр.

Из непрерывности $\psi(\mathbf{x})$ следует условие $f_l(0)=0$. Поэтому интерес представляет только такое решение радиального уравнения, которое при $r\to 0$ ведет себя, как Cr^{l+1}. Это условие определяет $f_l(r)$ с точностью до численного множителя. Далее при $E<0$ мы должны найти решение $f_l(r)$, которое при $r\to\infty$ ведет себя, как $Ce^{-\varkappa r}$ (в противном случае решение будет неограниченным). При произвольном отрицательном E эти условия оказываются несовместными. Те значения E, для которых удается построить решение, имеющее правильное поведение в нуле и на бесконечности, и есть собственные значения.

При любом $E>0$ решение $f_l(r)$ является ограниченным, поэтому достаточно, чтобы оно имело правильное поведение в нуле. Спектр при $E>0$ — непрерывный.

Собственные функции дискретного спектра описывают частицу, локализованную в окрестности силового центра, т. е. соответствуют финитному движению. При помощи собственных функций непрерывного спектра могут быть описаны состояния, в которых движение частицы является инфинитным.

Собственные функции дискретного спектра радиального уравнения мы будем обозначать через $f_{kl}(r)$, где индексом k нумеруются собственные значения E_{kl} уравнения при данном l,

$$H_l f_{kl}=E_{kl}f_{kl}.$$

Собственные функции непрерывного спектра, соответствующие энергии E, будем обозначать через f_{El}

$$H_l f_{El}=Ef_{El}.$$

Для широкого класса потенциалов доказана полнота системы функций $\{f_{kl}, f_{El}\}$ для каждого $l=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$ Это значит, что для произвольной функции* $f(r)\in L^2(0,\infty)$ справедливо представление:

$$f(r)=\sum_k C_k f_{kl}(r)+\int_0^\infty C(E)\,f_{El}(r)\,dE,$$

где $$C_k=\int_0^\infty f(r)\overline{f_{kl}(r)}\,dr,\quad C(E)=\int_0^\infty f(r)\overline{f_{El}(r)}\,dr.$$

* Через $L^2(0,\infty)$ мы обозначили пространство квадратично интегрируемых функций (без веса r^2) на $\mathbf{R}^+$. Если $f\in L^2(0,\infty)$, то $R=\frac{f}{r}\in L^2(\mathbf{R}^+)$.

Вернемся к трехмерной задаче. Функции дискретного спектра имеют вид

$$\psi_{klm}(\mathbf{x}) = \frac{f_{kl}(r)}{r} Y_{lm}(\mathbf{n})$$

и кратность собственного значения E_{kl} равна $2l+1$ (при отсутствии случайных вырождений). Для собственных функций непрерывного спектра имеем

$$\psi_{Elm} = \frac{f_{El}(r)}{r} Y_{lm}(\mathbf{n}).$$

Кратность непрерывного спектра бесконечная, так как для произвольного $E > 0$ есть решения радиальных уравнений при всех l и, кроме того, $m = -l, -l+1, \ldots, l$.

Параметры k, l и m, которые определяют собственные функции точечного спектра, называются радиальным, орбитальным и магнитным квантовыми числами соответственно. Эти названия появились в старой квантовой теории Бора — Зоммерфельда, в которой каждому допустимому значению энергии соответствовала определенная классическая орбита (или несколько таких орбит). Числа k и l определяли размеры и форму орбиты, а число m — ориентацию плоскости орбиты в пространстве. Число m играет существенную роль в магнитных явлениях, этим объясняется его название.

Из полноты системы функций $\{f_{kl}, f_{El}\}$ в $L^2(0,\infty)$ следует полнота системы $\{\psi_{klm}(\mathbf{x}), \psi_{Elm}(\mathbf{x})\}$ в $L^2(\mathbf{R}^3)$. Для краткости записи рассмотрим случай, когда точечный спектр у оператора H отсутствует. В этом случае произвольная функция $\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbf{R}^3)$ может быть представлена в виде

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \int_0^{\infty} C_{lm}(E)\, \psi_{Elm}(\mathbf{x})\, dE.$$

Ясно, что ψ определяется последовательностью функций $\{C_{lm}(E)\}$, поэтому мы получаем представление

$$\psi \leftrightarrow \{C_{lm}(E)\}$$

в пространстве последовательностей функций.

Скалярное произведение в этом пространстве задается формулой

$$(\psi_1, \psi_2) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \int_0^{\infty} C_{lm}^{(1)}(E)\, \overline{C_{lm}^{(2)}(E)}\, dE.$$

Из того факта, что $\psi_{Elm}(\mathbf{x})$ есть собственная функция операторов H, L^2 и L_3, легко понять, что в построенном представлении

операторы H, L^2 и L_3 действуют следующим образом:

$$\begin{aligned} HC_{lm}(E) &= EC_{lm}(E), \\ L^2C_{lm}(E) &= l(l+1)C_{lm}(E), \\ L_3C_{lm}(E) &= mC_{lm}(E). \end{aligned} \tag{5}$$

Поэтому построенное представление является собственным для трех коммутирующих операторов H, L^2 и L_3. (Уравнения (5) не следует путать с уравнениями для собственных векторов.)

§ 32. Атом водорода. Атомы щелочных металлов

Атом водорода представляет собой связанное состояние положительно заряженного ядра с зарядом e и электрона с зарядом $-e$ ($e > 0$ — абсолютная величина заряда электрона). Поэтому потенциал $V(r)$ имеет вид

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

Мы рассмотрим задачу о движении в поле

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Такой потенциал соответствует атому водорода при $Z = 1$ и водородоподобным ионам He^+, Li^{++}, ... при $Z = 2, 3, \ldots$ Оператор Шредингера в координатном представлении имеет вид

$$H = -\frac{1}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r},$$

где $\mu = mM/(m+M)$ — приведенная масса, а m и M — массы электрона и ядра соответственно. Задачу будем решать в так называемой атомной системе единиц, в которой $h = 1$, $\mu = 1$, $e^2 = 1$. Тогда радиальное уравнение Шредингера принимает вид

$$-\frac{1}{2}f_l''(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}f_l - \frac{Z}{r}f_l = Ef_l.$$

Мы будем интересоваться дискретным спектром, поэтому рассмотрим случай $E < 0$. Удобно обозначить $-2E = \varkappa^2$. Тогда

$$f_l'' + \frac{2Z}{r}f_l - \frac{l(l+1)}{r^2}f_l - \varkappa^2 f_l = 0. \tag{1}$$

Приведенные в предыдущем параграфе соображения о поведении решения при $r \to 0$ и $r \to \infty$ подсказывают, что решение удобно искать в виде

$$f_l(r) = r^{l+1}e^{-\varkappa r}\Lambda_l(r). \tag{2}$$

Если мы сумеем найти $\Lambda_l(r)$, представимую сходящимся степенным рядом

$$\Lambda_l(r) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i, \qquad (3)$$

с $a_0 \neq 0$, такую, что $f_l(r)$ удовлетворяет (1), то будет обеспечено и правильное поведение $f_l(r)$ при $r \to 0$. Поведение $f_l(r)$ при $r \to \infty$, конечно, будет зависеть от асимптотики функции $\Lambda_l(r)$ при $r \to \infty$.

Подстановку (2) в уравнение (1) удобно сделать в два приема. Вводя функцию g

$$f = e^{-\varkappa r} g,$$
$$f'' = e^{-\varkappa r}(\varkappa^2 g - 2\varkappa g' + g''),$$

имеем

$$g'' - 2\varkappa g' + \frac{2Z}{r} g - \frac{l(l+1)}{r^2} g = 0.$$

Далее, полагая

$$g = r^{l+1}\Lambda,$$
$$g' = r^{l+1}\left(\frac{\Lambda(l+1)}{r} + \Lambda'\right),$$
$$g'' = r^{l+1}\left(\frac{l(l+1)\Lambda}{r^2} + \frac{2(l+1)\Lambda'}{r} + \Lambda''\right),$$

получим

$$\Lambda_l'' + \left(\frac{2(l+1)}{r} - 2\varkappa\right)\Lambda_l' + \left(\frac{2Z}{r} - \frac{2\varkappa(l+1)}{r}\right)\Lambda_l = 0.$$

Ищем решение этого уравнения в виде ряда (3)

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i\left[i(i-1)r^{i-2} + 2(l+1)ir^{i-2} - 2i\varkappa r^{i-1} + (2Z - 2\varkappa l - 2\varkappa)r^{i-1}\right] = 0.$$

Сделаем замену значка суммирования $i \to i+1$ в первых двух слагаемых в квадратной скобке, тогда

$$\sum_{i=0}^{\infty} r^{i-1}\{a_{i+1}[(i+1)i + 2(i+1)(l+1)] - a_i[2\varkappa(i+l+1) - 2Z]\} = 0.$$

Приравнивая коэффициенты при степенях r, получим

$$a_{i+1} = 2\,\frac{\varkappa(i+l+1) - Z}{(i+1)(i+2l+2)}\,a_i. \qquad (4)$$

По признаку Даламбера видно, что ряд сходится при всех r. Оценим поведение ряда с коэффициентами, определяемыми (4) при больших r. Асимптотика при $r \to \infty$, конечно, определяется

коэффициентами при больших степенях, но тогда

$$a_{i+1} \cong \frac{2\varkappa}{i+1} a_i,$$

т. е.

$$a_i \cong C \frac{(2\varkappa)^i}{i!}$$

и

$$\Lambda_l \cong Ce^{2\varkappa r}.$$

Таким образом, для решения f_l при $r \to \infty$ получим

$$f_l \cong Cr^{l+1}e^{\varkappa r}.$$

(Разумеется, приведенное рассуждение можно было бы сделать более точным.)

Мы видим, что решение радиального уравнения, имеющее правильное поведение при $r \to 0$, экспоненциально возрастает при $r \to \infty$. Из формулы (4) видно, однако, что существуют такие значения $\varkappa$, что ряд будет обрываться на некотором члене. В этом случае функция Λ_l окажется многочленом, а решение $f_l(r)$ будет квадратично интегрируемым. Обозначим через k номер старшего коэффициента, отличного от нуля, т. е. $a_k \neq 0$, $a_{k+1} = 0$, $k = 0, 1, 2, \ldots$ Из (1) видно, что это возможно, если

$$\varkappa = \varkappa_{kl} = \frac{Z}{k+l+1}.$$

Из формулы $-2E = \varkappa^2$ получаем

$$E_{kl} = -\frac{Z^2}{2(k+l+1)^2}. \quad (5)$$

Параметр k является введенным ранее радиальным квантовым числом. Мы видим, что собственные значения E_{kl} зависят только от $n = k + l + 1$. Это число называется главным квантовым числом. Вспоминая, что $k = 0, 1, 2, \ldots$ и $l = 0, 1, 2, \ldots$, получаем: $n = 1, 2, 3, \ldots$ Далее при заданном n квантовое число l может принимать значения $0, 1, 2, \ldots, n-1$.

Итак, мы получили следующие результаты. Для собственных значений E справедлива формула

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad (6)$$

а собственные функции имеют вид

$$\psi_{nlm} = r^l e^{-\varkappa_n r} \Lambda_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (7)$$

где Λ_{nl} — многочлен степени $n - l - 1$, коэффициенты которого находятся по формуле (4), a_0 — из условия нормировки. Мы видим, что число собственных значений бесконечно и имеет точку сгущения $E = 0$. Нетрудно определить кратность собственного значения E_n. Каждому E_n соответствуют собственные функции ψ_{nlm}, различающиеся квантовыми числами l и m, при-

чем $l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$, а $m = -l, -l+1, \ldots, l$. Для кратности q получим

$$q = \sum_{l=0}^{n-1} (2l - 1) = n^2.$$

Кратность собственных значений для кулоновского поля оказывается большей, чем в общем случае центрального поля, имеет место дополнительное вырождение по l. Мы уже упоминали, что это «случайное» вырождение объясняется наличием более богатой, чем $SO(3)$ группы симметрии у оператора Шриденгера для атома водорода.

Посмотрим теперь, какую физическую информацию дает нам решение уравнения Шредингера для атома водорода. Прежде всего мы нашли допустимые значения энергии, которые разумно привести в обычных единицах. Для этого достаточно умножить выражение (6) для E_n на атомную единицу энергии, равную

$$\frac{\mu e^4}{h^2} = 4{,}36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27{,}21 \text{ эВ}.$$

Будем считать, что $Z = 1$, т. е. рассмотрим атом водорода, тогда

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2n^2h^2}. \tag{8}$$

Для энергии основного состояния атома водорода $(n = 1)$ имеем

$$E_1 = -\frac{\mu e^4}{2h^2} = -13{,}6 \text{ эВ}.$$

Абсолютная величина этой энергии называется потенциалом ионизации или энергией связи электрона в атоме и равна работе, которую нужно совершить, чтобы вырвать электрон из атома.

Формула (8) позволяет вычислить частоты спектральных линий атома водорода. Квантовая электродинамика подтверждает гипотезу Бора о том, что частота спектральной линии определяется по формуле

$$h\omega_{mn} = E_n - E_m, \quad E_n > E_m,$$

причем имеет место поглощение светового кванта, если атом переходит из состояния с меньшей энергией в состояние с большей энергией и излучение при обратном переходе*.

---

* Спектр поглощения (темные линии на ярком фоне) возникает, если световой поток непрерывного спектра проходит через среду, содержащую атомарный водород. Линии поглощения наблюдаются в звездных спектрах. Линейчатый спектр излучения будет наблюдаться, например, если в среде с атомарным водородом происходит электрический разряд. Тогда атомы водорода под действием электронных ударов будут переходить в возбужденные состояния. Переходы на уровни с меньшей энергией приведут к появлению ярких линий.

Для частот спектральных линий имеет место формула

$$\omega_{mn} = \frac{\mu e^4}{2h^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right), \quad n < m. \tag{9}$$

Эта формула называется формулой Бальмера и была открыта им чисто эмпирически задолго до создания квантовой механики.

Обратим внимание на зависимость частот ω_{mn} от приведенной массы μ. В природе существует две разновидности водорода: обычный водород H, ядром которого является протон

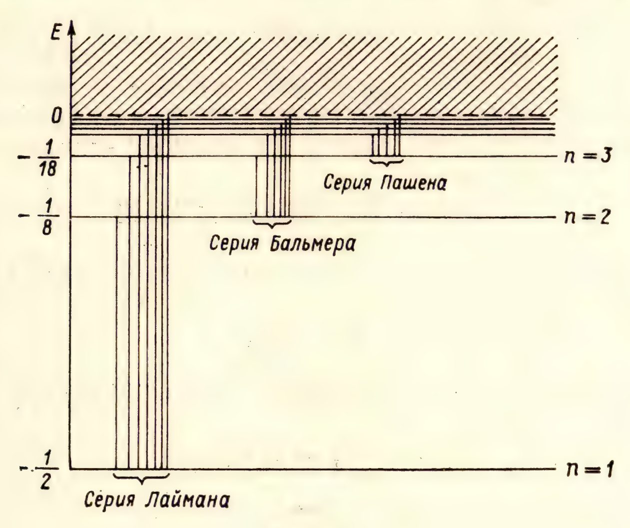


Рис. 8.

с массой $M = 1836m$ (m — масса электрона) и в небольшом количестве тяжелый водород — дейтерий D, ядро которого вдвое тяжелее протона. Используя формулу $\mu = mM/(m + M)$, легко сосчитать, что $\mu_D/\mu_H = 1{,}000272$, т. е. приведенные массы очень близки. Тем не менее точность спектроскопических измерений (длины волн измеряют с точностью в 7—8 значащих цифр) позволяет надежно измерить отношение ω_D/ω_H для соответствующих линий. Это отношение получается тоже равным 1,000272 (для некоторых линий возможно расхождение в последнем знаке). Вообще теоретически вычисленные по формуле (9) и экспериментальные значения частот совпадают с точностью в 5 значащих цифр. Имеющиеся расхождения, однако, могут быть устранены, если учесть релятивистские поправки.

Наряду с переходами между стационарными состояниями дискретного спектра возможны переходы из дискретного спектра в непрерывный и обратные переходы; физически они соответ-

ствуют процессам ионизации и рекомбинации (захвата электрона ядром). В этих случаях наблюдается непрерывный спектр поглощения или излучения *.

Спектральные линии водорода на спектрограммах группируются в серии, соответствующие определенному значению n в формуле (9) и $m = n + 1$, $n + 2$, ... Нескольким первым сериям присвоены имена: серия Лаймана ($n = 1$), серия Бальмера ($n = 2$), серия Пашена ($n = 3$). Линии серий Лаймана лежат в ультрафиолетовой части спектра, первые четыре линии серии Бальмера в видимой части спектра, линии серии Пашена и последующих серий в инфракрасной части спектра. К концу каждой серии линии сгущаются к так называемой границе серии, за которой начинается непрерывный спектр.

На рис. 8 горизонтальными линиями изображены энергетические уровни атома водорода, а вертикальными отрезками — возможные переходы между ними. Заштрихована область непрерывного спектра.

На рис. 9 схематично изображен вид спектральной серии, пунктиром изображена граница серии.

Важными характеристиками атомов являются вероятности переходов между состояниями. От вероятностей переходов зависят интенсивности спектральных линий. Переходы бывают спонтанные (самопроизвольные) с верхнего уровня на нижний с излучением кванта, вынужденные (под действием светового потока) и, наконец, переходы за счет столкновений с заряженными частицами. Формулы для вычисления вероятностей спонтанных и вынужденных переходов дает квантовая электродинамика, переходы за счет столкновений изучаются в квантовой теории рассеяния. Для вычисления всех этих характеристик необходимо знание волновых функций. Кроме того, знание волновых функций дает возможность судить о размерах атомов, распределении заряда в атоме и даже о форме атома. Напомним, что $|\psi(\mathbf{x})|^2$ есть плотность функции распределения координат. Под размером атома понимают размер той области, в которой $|\psi(\mathbf{x})|^2$ не является пренебрежимо малой. Ясно, что размер атома — понятие условное.

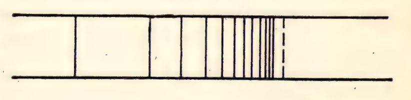


Рис. 9.

Рассмотрим для примера основное состояние атома водорода ($n = 1$, $l = 0$, $m = 0$). Учитывая, что $Y_{00}(\mathbf{n}) = \mathrm{const}$, $\varkappa_1 = 1$, по формуле (7) получим

$$\psi_{100}(\mathbf{x}) = Ce^{-r}.$$

---

* Слово «спектр» здесь используется в двух смыслах: спектр оператора и допустимые значения частоты электромагнитного излучения.

Из условия нормировки находим постоянную C:

$$\int_{R^3} |\psi|^2 d\mathbf{x} = |C|^2 4\pi \int_0^\infty e^{-2r} r^2 dr = |C|^2 \pi = 1,$$

откуда $C = 1/\sqrt{\pi}$ и

$$\psi_{100}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}.$$

Легко понять, что

$$\rho(r) = 4\pi |\psi_{100}(r)|^2 r^2 = 4e^{-2r} r^2$$

есть плотность функции распределения координаты r. График этой функции изображен на рис. 10. Максимум $\rho(r)$ достигается при $r_0 = 1$, т. е. $r_0 = 1$ — наиболее вероятное расстояние электрона от ядра. В обычных единицах $r_0 = h^2/\mu e^2 = 0{,}529 \cdot 10^{-8}$ см. Интересно отметить, что это число совпадает с радиусом первой боровской орбиты. Мы видим, что размеры атома водорода имеют порядок 10^{-8} см.

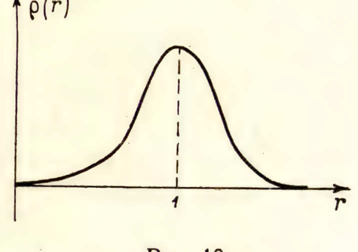


Рис. 10.

Под плотностью заряда в атоме понимают величину $-e|\psi(\mathbf{x})|^2$, т. е. считают, что электрон за счет быстрого движения около ядра как бы размывается по объему атома, образуя электронное облако.

Наконец, вид функции (7) показывает, что при $l \neq 0$ плотность распределения координат не является сферически симметричной. Зависимость этой плотности от углов позволяет говорить о форме атома в различных состояниях.

В этом же параграфе мы рассмотрим простую модель атомов щелочных металлов, основанную на предположении, что их оптические свойства объясняются движением валентного электрона в некотором центральном поле $V(r)$. Потенциал $V(r)$ можно записать в виде суммы двух слагаемых

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + V_1(r),$$

где первое слагаемое описывает взаимодействие электрона с ядром, а $V_1(r)$ может быть истолкован как потенциал взаимодействия электрона с распределенным по объему атома отрицательным зарядом остальных электронов. Разумность такой модели именно для атомов щелочных металлов станет понятной только после того, как мы познакомимся со свойствами сложных атомов и таблицей Менделеева.

О потенциале $V(r)$ мы знаем очень мало, но все же можно утверждать, что

$$V(r) \cong -\frac{1}{r} \quad \text{при} \quad r \to \infty$$

и

$$V(r) \cong -\frac{Z}{r} \quad \text{при} \quad r \to 0.$$

Первое условие следует из того очевидного факта, что при удалении валентного электрона на бесконечность он оказывается в поле положительного однозарядного иона. Второе условие вытекает из непрерывности потенциала объемного распределения зарядов $V_1(r)$.

В качестве модельного потенциала мы выберем

$$V(r) = -\frac{1}{r} - \frac{\alpha}{r^2}, \quad \alpha > 0. \tag{9}$$

Несмотря на то, что этот потенциал обладает правильным поведением на бесконечности, он имеет иное, чем «истинный» потенциал поведение в нуле. В то же время модельный потенциал правильно отражает тот факт, что при приближении к ядру поле становится более сильным, чем кулоновское $-1/r$. Мы предположим, что параметр α мал (в каком смысле, укажем ниже). Численные значения этого параметра для разных атомов щелочных металлов разумнее всего выбирать из сравнения результатов расчетов энергетических уровней с найденными экспериментально.

Радиальное уравнение для такого потенциала решается очень просто. Действительно, оно имеет вид

$$f_l'' + \frac{2}{r} f_l + \frac{2\alpha}{r^2} f_l - \frac{l(l+1)}{r^2} f_l - \varkappa^2 f_l = 0. \tag{10}$$

Введем число l', которое удовлетворяет уравнению

$$l'(l'+1) + 2\alpha - l(l+1) = 0$$

и условию $\lim\limits_{\alpha \to 0} l' = l$, откуда получим $l' = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - 2\alpha}$. Уравнение (10) может быть переписано в виде

$$f_l'' + \frac{2}{r} f_l - \frac{l'(l'+1)}{r^2} f_l - \varkappa^2 f_l = 0,$$

т. е. формально совпадает с уравнением для кулоновского поля. Все это может иметь смысл только при условии, что $l(l+1) + 1/4 - 2\alpha > 0$. В противном случае мы получим для l' комплексные значения *.

---

* Можно показать, что при $2\alpha - l(l+1) > 1/4$ радиальный оператор Шредингера

$$H_l = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1) - 2\alpha}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

становится неограниченным снизу.

Предположим, что $\alpha < 1/8$, тогда условие $l(l+1) + 1/4 - 2\alpha > 0$ выполняется при всех l. Обычно l' записывают с точностью до членов порядка α^2, т. е.

$$l' \cong l - \frac{\alpha}{l + 1/2} = l - \sigma_l.$$

Тогда используя формулу (5) при $Z = 1$, получим

$$E_{kl} = -\frac{1}{2(k + l - \sigma_l + 1)^2}$$

или, вводя главное квантовое число $n = k + l + 1$,

$$E_{nl} = -\frac{1}{2(n - \sigma_l)^2}. \tag{11}$$

Из формулы (11) видно, что для потенциала (9) снимается кулоновское вырождение по l. Уровни энергии E_{nl} лежат глубже, чем уровни атома водорода E_n, и с ростом n уровни E_{nl} и E_n сближаются. Формула (11) неплохо описывает уровни энергии атомов щелочных металлов при соответствующем значении α. Эта формула была впервые получена Ридбергом на основе анализа экспериментальных данных. Заметим, что для атомов щелочных металлов главное квантовое число, как и для водорода, принимает целые значения, но минимальное значение n равно не 1, а 2 для Li, 3 для Na, ..., так как состояния с меньшим главным квантовым числом заняты электронами внутренних оболочек атома (это утверждение станет понятным после того, как мы познакомимся со строением сложных атомов).

В заключение заметим, что рассмотренная модель иллюстрирует полуэмпирический подход к решению сложных квантовомеханических задач. Такой подход состоит в следующем: вместо того чтобы решать задачу в точной постановке, из физических соображений строится упрощенная модель системы. Оператор Шредингера для модельной задачи обычно зависит от параметров, найти которые теоретически так же трудно, как и решить задачу во всем объеме. Поэтому параметры находятся из сравнения результатов расчетов модельной задачи с экспериментальными данными.

§ 33. Теория возмущений

В квантовой механике существует сравнительно мало интересных задач, которые допускают построение точных решений. Поэтому важную роль играют приближенные методы. Часто приближенные теории оказываются более ценными для понимания физических явлений, чем точные численные решения соответствующих уравнений. Основные приближенные методы квантовой механики основаны на теории возмущений и вариационном принципе.

Опишем постановку задачи в теории возмущений. Пусть дан самосопряженный оператор A, спектр которого известен. Требуется найти спектр оператора $B = A + C$ при условии, что самосопряженный оператор C в каком-то смысле мал. Мы не уточняем, что подразумевается под малостью оператора C, так как будет рассматриваться только формальная схема теории возмущений. Подведение строгой базы под такую схему требует решения ряда сложных математических задач.

Мы разберем случай, когда спектр оператора A чисто точечный и начнем с задачи о возмущении простого собственного значения. Введем однопараметрическое семейство операторов

$$A_\varepsilon = A + \varepsilon C. \tag{1}$$

Ясно, что $A_0 = A$ и $A_1 = B$. Нам известны собственные векторы ψ_n и собственные значения λ_n оператора A, которые удовлетворяют уравнению

$$A\psi_n = \lambda_n \psi_n. \tag{2}$$

Мы предполагаем, что спектр оператора A простой, т. е. каждому λ_n соответствует один собственный вектор ψ_n.

Напишем уравнение для собственных векторов оператора A_ε

$$A_\varepsilon \psi_\varepsilon = \lambda_\varepsilon \psi_\varepsilon. \tag{3}$$

Основное предположение, которое мы сделаем, состоит в том, что ψ_ε и λ_ε аналитически зависят от ε, т. е. они могут быть представлены в виде

$$\lambda_\varepsilon = \lambda^{(0)} + \varepsilon\lambda^{(1)} + \varepsilon^2\lambda^{(2)} + \ldots, \tag{4}$$

$$\psi_\varepsilon = \psi^{(0)} + \varepsilon\psi^{(1)} + \varepsilon^2\psi^{(2)} + \ldots \tag{5}$$

Подставляя (4) и (5) в уравнение (3)

$$(A + \varepsilon C)(\psi^{(0)} + \varepsilon\psi^{(1)} + \ldots) = (\lambda^{(0)} + \varepsilon\lambda^{(1)} + \ldots)(\psi^{(0)} + \varepsilon\psi^{(1)} + \ldots)$$

и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях ε, получим систему уравнений

$$\begin{aligned}
&A\psi^{(0)} = \lambda^{(0)}\psi^{(0)},\\
&A\psi^{(1)} + C\psi^{(0)} = \lambda^{(0)}\psi^{(1)} + \lambda^{(1)}\psi^{(0)},\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
&A\psi^{(n)} + C\psi^{(n-1)} = \lambda^{(0)}\psi^{(n)} + \lambda^{(1)}\psi^{(n-1)} + \ldots + \lambda^{(n)}\psi^{(0)},\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots
\end{aligned}$$

которую нам удобнее переписать следующим образом:

$$\begin{aligned}
&A\psi^{(0)} = \lambda^{(0)}\psi^{(0)},\\
&(A - \lambda^{(0)})\,\psi^{(1)} = (\lambda^{(1)} - C)\,\psi^{(0)},\\
&(A - \lambda^{(0)})\,\psi^{(2)} = (\lambda^{(1)} - C)\,\psi^{(1)} + \lambda^{(2)}\psi^{(0)},\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\\
&(A - \lambda^{(0)})\,\psi^{(n)} = (\lambda^{(1)} - C)\,\psi^{(n-1)} + \ldots + \lambda^{(n)}\psi^{(0)}.\\
&\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots
\end{aligned} \tag{6}$$

Из первого уравнения (6) следует, что $\psi^{(0)}$ является собственным вектором оператора A; из предположения о простоте спектра следует *, что

$$\lambda^{(0)} = \lambda_n, \quad \psi^{(0)} = \psi_n.$$

Прежде чем обращаться к следующим уравнениям (6), выберем условие нормировки вектора ψ_ε. Оказывается, что наиболее удобным является условие

$$(\psi_\varepsilon, \psi^{(0)}) = 1. \tag{7}$$

Мы считаем, что $\psi^{(0)}$ нормирован обычным образом $\| \psi^{(0)} \| = 1$, поэтому условие (7) эквивалентно условиям

$$(\psi^{(1)}, \psi^{(0)}) = 0, \ldots, (\psi^{(n)}, \psi^{(0)}) = 0, \ldots. \tag{8}$$

Таким образом, поправки $\psi^{(1)}, \ldots, \psi^{(n)}, \ldots$ мы можем искать в подпространстве, ортогональном к вектору $\psi^{(0)} = \psi_n$.

Обратимся теперь ко второму уравнению (6). Это уравнение является уравнением второго рода с самосопряженным оператором A, и $\lambda^{(0)}$ является собственным значением оператора A. Необходимым и достаточным условием существования решения этого уравнения является ортогональность правой части этого уравнения вектору $\psi^{(0)}$. Из условия

$$(\psi^{(0)}, (\lambda^{(1)} - C)\psi^{(0)}) = 0$$

сразу получаем, что

$$\lambda^{(1)} = (C\psi^{(0)}, \psi^{(0)})$$

или подробнее

$$\lambda_n^{(1)} = (C\psi_n, \psi_n). \tag{9}$$

Формула (9) имеет очень простое физическое толкование. Поправка первого порядка к собственному значению λ_n совпадает со средним значением возмущения C в невозмущенном состоянии ψ_n.

Посмотрим, что дает второе уравнение (6) для вектора $\psi^{(1)}$. Казалось бы, следовало написать

$$\psi^{(1)} = (A - \lambda^{(0)} I)^{-1} (\lambda^{(1)} - C)\psi^{(0)}. \tag{10}$$

Однако эта формула нуждается в уточнении. Чтобы понять, почему это так, рассмотрим подробнее оператор $(A - \lambda I)^{-1}$, который называется резольвентой оператора A. Оператор A можно записать в виде

$$A = \sum_m \lambda_m P_m,$$

---

* В дальнейшем следовало бы снабжать индексом n собственные векторы ψ_ε, собственные значения λ_ε и $\lambda^{(k)}$, $\psi^{(k)}$. Мы этого не делаем для сокращения записи.

где P_m — проектор на собственный вектор ψ_m, т. е. $P_m\varphi = (\varphi, \psi_m)\psi_m$. Тогда для оператора $(A-\lambda I)^{-1}$ имеем

$$(A-\lambda I)^{-1} = \sum_m \frac{P_m}{\lambda_m - \lambda}. \tag{11}$$

Из формулы (11) видно, что резольвента теряет смысл при $\lambda = \lambda_n$, т. е. как раз при тех значениях параметра λ, которые нас интересуют. Вспомним, однако, что правая часть второго уравнения (6) ортогональна к $\psi^{(0)} = \psi_n$ и $(\psi^{(1)}, \psi^{(0)}) = 0$. Поэтому на самом деле нам нужен не оператор $(A-\lambda I)^{-1}$, а оператор $(A-\lambda I)^{-1}P$, действующий в подпространстве, ортогональном к ψ_n. Здесь через P обозначен проектор $I - P_n$, проектирующий на подпространство, ортогональное к вектору ψ_n.

Оператор $(A-\lambda I)^{-1}P$ может быть представлен в виде

$$(A-\lambda I)^{-1} P = \sum_{m\neq n} \frac{P_m}{\lambda_m - \lambda}; \tag{12}$$

он сохраняет смысл при $\lambda = \lambda_n$. Вместо формулы (10) мы должны написать

$$\psi^{(1)} = (A - \lambda^{(0)} I)^{-1} P (\lambda^{(1)} - C)\psi^{(0)}. \tag{13}$$

Это выражение можно преобразовать следующим образом:

$$(A - \lambda_n I)^{-1} P [(C\psi_n, \psi_n)\psi_n - C\psi_n] =$$
$$= (A - \lambda_n I)^{-1} P (P_n - I) C\psi_n = -(A - \lambda_n I)^{-1} PC\psi_n,$$

поэтому

$$\psi_n^{(1)} = -(A - \lambda_n I)^{-1} PC\psi_n. \tag{14}$$

Используя (12), получим

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n} \frac{(C\psi_n, \psi_m)}{\lambda_n - \lambda_m}\psi_m. \tag{15}$$

Рассмотрим поправки следующих порядков. Из условия ортогональности правой части третьего уравнения (6) вектору $\psi^{(0)}$ сразу получаем

$$\lambda^{(2)} = (C\psi^{(1)}, \psi^{(0)}). \tag{16}$$

Используя вид $\psi^{(1)}$, находим явную формулу для второй поправки к собственному значению λ_n

$$\lambda_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{|(C\psi_n, \psi_m)|^2}{\lambda_n - \lambda_m}. \tag{17}$$

Мы не будем приводить подробных вычислений для $\psi^{(2)}$ и последующих поправок $\psi^{(n)}$, $\lambda^{(n)}$. Заметим только, что они могут быть найдены с помощью формул $\lambda^{(n)} = (C\psi^{(n-1)}, \psi^{(0)})$, $\psi^{(n)} = (A - \lambda^{(0)} I) P$ (правая часть уравнения (6)).

Обсудим теперь особенности теории возмущений кратного собственного значения. Мы ограничимся построением поправки первого приближения $\lambda^{(1)}$. Пусть $\lambda_n = \lambda$ (индекс n мы опускаем) является собственным значением оператора A кратности q

$$A\psi_i = \lambda\psi_i, \quad i = 1, 2, \ldots, q.$$

Обозначим через $\mathscr{H}_\lambda$ собственное подпространство оператора A, соответствующее собственному значению λ, через Q — проектор на это подпространство.

Обратимся снова к системе уравнений (6). Из первого уравнения, как и раньше, следует, что $\lambda^{(0)} = \lambda$. Что касается векторов $\psi^{(0)}$, то мы можем лишь утверждать, что $\psi^{(0)} \in \mathscr{H}_\lambda$. Мы покажем сейчас, что на векторы $\psi^{(0)}$ накладываются дополнительные ограничения, поэтому они в общем случае не совпадают с собственными векторами ψ_i. Действительно, второе уравнение (6) имеет решения, если его правая часть ортогональна подпространству $\mathscr{H}_\lambda$, т. е.

$$Q(\lambda^{(1)} - C)\psi^{(0)} = 0.$$

Учитывая, что $Q\psi^{(0)} = \psi^{(0)}$, последнее уравнение можно переписать в виде

$$QCQ\psi^{(0)} = \lambda^{(1)}\psi^{(0)}. \tag{18}$$

Мы видим, что $\psi^{(0)}$ являются собственными векторами q-мерного оператора QCQ, а $\lambda^{(1)}$ — его собственные значения. Практически задача сводится к диагонализации матрицы q-го порядка. Действительно, подставляя в (18) $\psi^{(0)} = \sum_{i=1}^{q} a_i\psi_i$ и учитывая, что $Q\varphi = \sum_{j=1}^{q} (\varphi, \psi_j)\psi_j$, получим

$$\sum_j \sum_i a_i (C\psi_i, \psi_j)\psi_j = \lambda^{(1)} \sum_j a_j\psi_j$$

или

$$\sum_i C_{ji} a_i = \lambda^{(1)} a_j,$$

где $C_{ji} = (C\psi_i, \psi_j)$. Матрица $\| C_{ij} \|$ является самосопряженной, поэтому всегда может быть приведена к диагональному виду. Обозначим собственные значения этой матрицы через $\lambda_j^{(1)}$, $j = 1, 2, \ldots, q$. Кратному собственному значению λ невозмущенного оператора A соответствует q собственных значений оператора $B = A + C$, которые в первом приближении теории возмущений имеют вид $\lambda + \lambda_j^{(1)}$, $j = 1, 2, \ldots, q$. Обычно говорят, что возмущение снимает вырождение. Разумеется, снятие вырождения может оказаться неполным, если среди чисел $\lambda_j^{(1)}$ окажутся одинаковые, т. е. оператор QCQ имеет кратные собственные значения.

Пример. Рассмотрим систему с оператором Шредингера

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} - \alpha B L_3. \tag{19}$$

Такой оператор Шредингера описывает атом водорода, помещенный в постоянное однородное магнитное поле, вектор индукции которого направлен по третьей оси *.

В качестве невозмущенного оператора разумно взять оператор

$$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r},$$

т. е. оператор Шредингера для атома водорода, а

$$\Delta H = -\alpha B L_3$$

рассматривать как возмущение. С физической точки зрения ΔH мало, так как магнитная сила, действующая на электрон атома в достижимых магнитных полях, на несколько порядков меньше кулоновской силы притяжения к ядру. Напомним, что собственные функции оператора H_0 $\psi_{nlm}(\mathbf{x})$ являются и собственными функциями оператора L_3

$$L_3\psi_{nlm} = m\psi_{nlm}.$$

Матрица возмущения ΔH сразу оказывается диагональной, и ее диагональные элементы равны $-\alpha m B$. Поэтому для энергии атома водорода в магнитном поле имеет место формула **

$$E_{nm} = -\frac{1}{2n^2} - \alpha B m. \tag{20}$$

Мы видим, что магнитное поле снимает вырождение по магнитному квантовому числу m, однако остается характерное для кулоновского поля вырождение по l.

---

* В электродинамике магнитным моментом частицы с зарядом e называется вектор

$$\mathbf{M} = \frac{e}{2c}\mathbf{x}\times\mathbf{v} = \frac{e}{2c\mu}\mathbf{x}\times\mathbf{p} = \frac{e}{2c\mu}\mathbf{l}.$$

Здесь μ — масса частицы, $\mathbf{v}$ — скорость частицы, c — скорость света, $\mathbf{l}$ — момент импульса частицы. Функция Гамильтона частицы в однородном постоянном магнитном поле $\mathbf{B}$ содержит дополнительное слагаемое $-\mathbf{MB}$. Для атома водорода, помещенного в магнитном поле, направленное по третьей оси, функция Гамильтона имеет вид

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} - \frac{e}{2c\mu}Bl_3.$$

Соответствующий оператор Шредингера в атомных единицах совпадает с (19) при $\alpha = 1/2c$.

** Приведенный пример является не совсем удачным, так как функции ψ_{nlm} являются точными собственными функциями оператора H с собственными значениями (20).

Явление, состоящее в расщеплении уровней энергии атомов в магнитном поле и в соответствующем расщеплении их спектральных линий, носит название эффекта Зеемана.

Интересно взглянуть на это явление с точки зрения теории групп. Вырождение по m объясняется сферической симметрией оператора Шредингера. Магнитное поле, направленное по оси x_3, нарушает такую симметрию. Группой симметрии оператора Шредингера атома в магнитном поле является группа вращений вокруг третьей оси. Эта группа абелева и все ее неприводимые представления одномерны. Поэтому наличие такой группы симметрии не вызывает вырождения, любое вырождение будет случайным.

§ 34. Вариационный принцип

Рассмотрим функционал

$$E = \frac{(H\psi, \psi)}{(\psi, \psi)}, \quad \psi \in \mathscr{H}. \tag{1}$$

Этот функционал имеет простой физический смысл: E есть среднее значение энергии системы в состоянии, задаваемом вектором $\psi/\|\psi\|$. Если $\psi = \psi_n$, где ψ_n — собственный вектор оператора H, соответствующий собственному значению E_n, то $E = E_n$. Вычислим вариацию функционала (1)

$$\delta E = \frac{(H\,\delta\psi, \psi) + (H\psi, \delta\psi)}{(\psi, \psi)} - \frac{(H\psi, \psi)\,[(\delta\psi, \psi) + (\psi, \delta\psi)]}{(\psi, \psi)^2} = \\ = 2\mathrm{Re}\,\frac{((H-E)\,\psi, \delta\psi)}{(\psi, \psi)}.$$

Легко видеть, что условие стационарности функционала E

$$\delta E = 0 \tag{2}$$

эквивалентно уравнению Шредингера

$$H\psi = E\psi. \tag{3}$$

Действительно, из (3) сразу следует (2). Чтобы проверить обратное утверждение, достаточно наряду с вариацией $\delta\psi$ рассмотреть $\delta\psi_1 = i\delta\psi$. Тогда из условия (2) следует, что

$$\frac{((H-E)\,\psi, \delta\psi)}{(\psi, \psi)} = 0$$

и из произвольности $\delta\psi$ следует (3).

Отметим еще одно важное свойство функционала E. Для любого вектора $\psi \in \mathscr{H}$ $E \geqslant E_0$, где E_0 — наименьшее собственное значение, причем знак равенства имеет место только при $\psi = C\psi_0$. Это утверждение почти очевидно, так как среднее значение энергии не меньше минимально возможного. Проверим его формально для оператора H с простым чисто точечным спектром. Будем считать, что собственные значения занумеро-

ваны в порядке возрастания: $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$. Подставляя в (1) $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n$, получим

$$E - E_0 = \frac{\sum_n E_n |C_n|^2}{\sum_n |C_n|^2} - E_0 = \frac{\sum_n (E_n - E_0) |C_n|^2}{\sum_n |C_n|^2} \geqslant 0, \qquad (4)$$

так как $E_n - E_0 \geqslant 0$. Знак равенства в (4) достигается, если $C_n = 0$ при $n = 1, 2, \ldots$ В этом случае $\psi = C_0 \psi_0$. Аналогично проверяется, что

$$\begin{aligned} &E \geqslant E_1, \quad \text{если} \quad (\psi, \psi_0) = 0, \\ &E \geqslant E_2, \quad \text{если} \quad (\psi, \psi_0) = 0, \ (\psi, \psi_1) = 0, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \qquad (5)$$

Свойство $E \geqslant E_0$ делает вариационный принцип особенно эффективным для расчета основного состояния системы. Подставляя в (1) произвольный вектор $\psi \in \mathscr{H}$, мы получаем оценку сверху для E_0; из двух значений функционала (1) E' и E'' более близким к E_0 является меньшее. Использование свойств (5) для оценки E_n наталкивается на трудности, так как нам неизвестны собственные векторы $\psi_0, \ldots, \psi_{n-1}$.

Существует вторая формулировка вариационного принципа, которая утверждает, что уравнение Шредингера (3) эквивалентно условию стационарности функционала $(H\psi, \psi)$ при $(\psi, \psi) = 1$. Используя метод неопределенных множителей Лагранжа, последнее условие можно записать в виде

$$\delta [(H\psi, \psi) - E (\psi, \psi)] = 0, \qquad (6)$$

где E — множитель Лагранжа. Эквивалентность (6) и (3) проверяется так же, как эквивалентность (2) и (3).

Вариационные принципы могут использоваться двумя способами для получения приближенных решений уравнения (3). Первый способ состоит в том, что приближенная волновая функция ищется в классе функций определенного аналитического вида, зависящих от нескольких параметров $\alpha_1, \ldots, \alpha_k$. Тогда $E = E(\alpha_1, \ldots, \alpha_k)$, и параметры находятся из условий

$$\frac{\partial E(\alpha_1, \ldots, \alpha_k)}{\partial \alpha_i} = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, k.$$

При втором способе приближенная собственная функция H для сложной системы (например, для атома), зависящая от многих переменных $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N)$, строится при помощи неизвестных функций от меньшего числа переменных (чаще всего представляется в виде произведения $\psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_2(\mathbf{x}_2) \ldots \psi_N(\mathbf{x}_N)$ или линейной комбинации таких произведений). Из вариационного принципа находятся уравнения для функций $\psi_1, \ldots, \psi_N$.

С этим способом мы познакомимся, когда будем изучать сложные атомы.

Пример. Применим вариационный принцип для приближенного расчета основного состояния атома гелия. Оператор Шредингера для гелия в атомных единицах имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}.$$

В качестве пробной функции возьмем *

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \alpha) = e^{-\alpha r_1} e^{-\alpha r_2}.$$

Вычисления, которые мы не приводим, дают простое выражение для функционала

$$E(\alpha) = \alpha^2 - \frac{27}{8}\alpha.$$

Минимум этого выражения достигается при $\alpha = 27/16$, и приближенное теоретическое значение энергии основного состояния

$$E_0 = E(27/16) = -(27/16)^2 \cong -2{,}85.$$

Экспериментальное значение $E_{0\,\text{эксп}} = -2{,}90$. Мы видим, что такой простой расчет приводит к весьма хорошему согласию с экспериментом. Как и следовало ожидать, теоретическое значение E_0 больше экспериментального.

Заметим, что $e^{-\alpha r}$ является собственной функцией основного состояния частицы в кулоновском поле $-\alpha/r$. Поэтому приближенная собственная функция $e^{-\frac{27}{16}(r_1+r_2)}$ является точной собственной функцией для оператора

$$H' = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{27}{16r_1} - \frac{27}{16r_2}.$$

Взаимодействие между электронами в приближенном операторе Шредингера H' учтено заменой заряда ядра $Z = 2$ на $Z' = 27/16$, тем самым учтена экранировка ядра зарядом электрона.

В заключение отметим, что при расчетах атома гелия использовались пробные функции с огромным числом параметров и была достигнута такая точность, что имеющиеся расхождения с экспериментом могут быть объяснены релятивистскими поправками. Столь точное решение задачи об основном состоянии атома гелия имеет принципиальное значение для квантовой механики и подтверждает справедливость ее уравнений для задачи трех тел.

---

* Выбор пробной функции можно объяснить тем, что функция $e^{-2r_1-2r_2}$ является точной собственной функцией оператора $H - 1/r_{12}$. Действительно, если в H отбросить член $1/r_{12}$, то разделением переменных такая задача сводится к задаче о водородоподобном ионе, а, как было показано, собственная функция основного состояния такого иона есть e^{-Zr}, где Z — заряд ядра.

§ 35. Теория рассеяния. Физическая постановка задачи

Мы начнем с описания физической постановки задачи о рассеянии. Пусть пучок частиц сорта a, получаемый от ускорителя, падает на мишень, состоящую из частиц сорта b. Схема такого опыта изображена на рис. 11.

Частицы a и b могут быть как элементарными, например, электроны, протоны, нейтроны, так и составными, например, атомы, молекулы, атомные ядра. Экспериментатор изучает физические характеристики частиц, вылетающих из мишени. Если они отличаются от соответствующих характеристик падающих частиц, то можно говорить, что частица a испытала рассеяние.

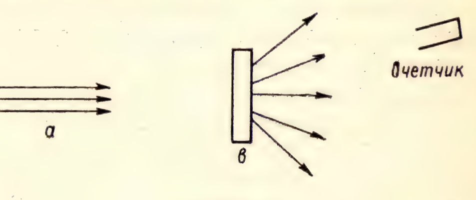


Рис. 11.

Обычно стремятся выбрать такую толщину мишени, чтобы достаточно большое число частиц a рассеялось на частицах b и в то же время, чтобы доля частиц a, испытавших многократное столкновение, была пренебрежимо мала. В этом случае для объяснения результатов экспериментов достаточно изучить задачу о рассеянии частицы a на частице b. Такая задача является задачей двух тел, если частицы a и b элементарные, и задачей многих тел, если частицы a и b составные. Напомним, что задача двух тел отделением движения центра инерции сводится к задаче о движении частицы в поле неподвижного силового центра. Эта задача является простейшей задачей теории рассеяния.

При рассеянии на силовом центре вследствие закона сохранения энергии частица может изменить лишь направление своего движения. В этом случае говорят об упругом рассеянии. При столкновении составных частиц возможны более сложные процессы. Например, при столкновении электрона с атомом водорода возможно упругое рассеяние (состояние атома не меняется), рассеяние с возбуждением (электрон передает часть своей энергии атому, который переходит в новое состояние) и, наконец, ионизация атома электроном. Каждый такой процесс называется каналом рассеяния. Рассеяние частицы на силовом центре является одноканальным, а рассеяние составных частиц обычно многоканальным. Если, однако, сталкивающиеся частицы a и b находятся в основном состоянии и энергия их относительного движения меньше энергии возбуждения, то рассеяние будет одноканальным.

Основной характеристикой различных процессов рассеяния, которая измеряется в экспериментах, является их сечение,

которое мы определим ниже. Процессом рассеяния мы называем некоторое множество возможных результатов рассеяния. В этом смысле процессами являются:

1) упругое рассеяние в элемент телесного угла $d\mathbf{n}$, построенный около направления $\mathbf{n}$;

2) упругое рассеяние на произвольный угол;

3) рассеяние в телесный угол $d\mathbf{n}$ с возбуждением мишени с i-го уровня на k-й;

4) рассеяние с ионизацией мишени;

5) процесс, состоящий в том, что рассеяние вообще имело место, и т. д.

Вероятность N какого-либо процесса рассеяния a на b зависит от некоторой величины, которая характеризует точность «стрельбы» частицами a по частице b. Чтобы ввести такую характеристику состояния налетающей частицы a, построим плоскость, проходящую через точку, в которой находится рассеиватель b, и перпендикулярную импульсу налетающей частицы a. Вероятность dW пересечь площадку dS этой плоскости для частицы a пропорциональна dS, т. е. $dW = I dS$. Ясно, что вероятность N будет пропорциональна величине I, вычисленной в точке, где помещен рассеиватель *.

Теперь естественным представляется определение сечения σ:

$$\sigma = \frac{N}{I}.$$

Сечения перечисленных выше пяти процессов носят названия: 1) дифференциальное сечение упругого рассеяния, 2) полное сечение упругого рассеяния, 3) дифференциальное сечение возбуждения, 4) сечение ионизации, 5) полное сечение. Понятие сечения становится особенно наглядным, если предположить, что имеет место полный детерминизм результатов рассеяния. При таком детерминизме результат рассеяния определялся бы той точкой поперечного сечения пучка, через которую прошла бы частица при отсутствии рассеивателя. Процессу рассеяния соответствовала бы тогда некоторая область в плоскости поперечного сечения, и сечение равнялось бы площади этой области.

Перед теорией рассеяния стоят две задачи: по известным потенциалам взаимодействия между частицами найти сечения различных процессов (прямая задача) и по известным сечениям получить информацию о взаимодействии частиц (обратная задача).

В лекциях мы ограничимся изучением прямой задачи рассеяния частицы на потенциальном центре и начнем с простейшего одномерного случая.

---

* Рассеиватель b при этом считается удаленным, так как I характеризует состояние свободно движущейся частицы a.

§ 36. Рассеяние одномерной частицы на потенциальном барьере

Изложение этого вопроса мы построим по следующему плану. Сначала мы сформулируем так называемую стационарную задачу о рассеянии. Для этого мы изучим решения уравнения $H\psi = E\psi$ некоторого специального вида. Физический смысл таких решений мы выясним позже, построив при их помощи решения нестационарного уравнения Шредингера $i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$. Для простоты записи мы используем систему единицы, в которой $\hbar = 1$, $m = 1/2$.

Оператор Шредингера в координатном представлении имеет вид

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{1}$$

Функцию $V(x)$ мы будем считать финитной ($V(x) = 0$, $|x| > a$) и кусочно-непрерывной.

Условимся называть области $x < -a$, $x > a$ и $-a < x < a$ вещественной оси областями I, II и III соответственно. Задача о рассеянии является задачей об инфинитном движении частицы. Такое движение возможно при $E > 0$, и мы знаем, что при $E > 0$ спектр оператора Шредингера непрерывен. С математической точки зрения задачи о рассеянии являются задачами о непрерывном спектре оператора Шредингера.

Стационарное уравнение Шредингера, которое на всей вещественной оси имеет вид

$$-\psi'' + V(x)\psi = k^2\psi, \quad E = k^2, \quad k > 0, \tag{2}$$

упрощается в областях I и II

$$\psi'' + k^2\psi = 0. \tag{3}$$

Уравнение (3) имеет два линейно-независимых решения e^{ikx} и e^{-ikx}. Решения уравнения (2) на всей оси могут быть построены сшиванием решений в областях I—III. При сшивании мы должны использовать условия непрерывности решений и их первых производных в точках $-a$ и a. Это накладывает четыре условия на шесть произвольных постоянных, входящих в выражения для общих решений в областях I—III. Пятым условием для этих постоянных является условие нормировки. Поэтому могут быть построены линейно-независимые решения уравнения (2), которые в областях I и II имеют вид *

$$\begin{array}{lll} & \text{I} & \text{II} \\ \psi_1(k, x), & e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & B(k)e^{ikx}, \\ \psi_2(k, x), & D(k)e^{-ikx}, & e^{-ikx} + C(k)e^{ikx}. \end{array} \tag{4}$$

* Если потенциал не является финитным, но достаточно быстро убывает при $|x| \to \infty$, то приведенные выражения для ψ_1 и ψ_2 в областях I и II следует рассматривать как асимптотики функций ψ_1 и ψ_2 при $x \to \pm\infty$. Изучать этот случай мы не будем.

Например, при построении решения ψ_1 мы, используя произвольность одной из констант, полагаем равным нулю коэффициент при e^{-ikx} в области II. Далее мы выбираем равным единице коэффициент при e^{ikx} в области I, тем самым определяя нормировку функции ψ_1. Коэффициенты A и B находятся из условий сшивания вместе с постоянными m и n, где $m\varphi_1 + n\varphi_2$ — общее решение (2) в области II. Нетрудно убедиться, что условия сшивания приводят к линейной неоднородной системе уравнений для A, B, m и n с определителем, отличным от нуля, если φ_1 и φ_2 линейно-независимы. Аналогично строится решение ψ_2. Линейная независимость решений ψ_1 и ψ_2 следует из того, что вронскиан этих решений не равен нулю.

Выясним свойства коэффициентов A, B, C и D. Для этого заметим, что вронскиан $W(\varphi_1, \varphi_2) = \varphi_1\varphi_2' - \varphi_1'\varphi_2$ решений φ_1 и φ_2 уравнения (2) не зависит от x. Действительно, пусть φ_1 и φ_2 удовлетворяют (2), тогда

$$\varphi_1'' - (V - k^2)\varphi_1 = 0, \quad \varphi_2'' - (V - k^2)\varphi_2 = 0.$$

Умножая первое из равенств на φ_2, второе на φ_1 и вычитая одно из другого, получим

$$\frac{d}{dx}(\varphi_1\varphi_2' - \varphi_1'\varphi_2) = 0.$$

Используя это свойство, мы можем приравнивать вронскианы для любой пары решений в областях I и II. Выбирая в качестве таких пар решений последовательно ψ_1, ψ_2; ψ_1, $\bar{\psi}_1$; ψ_2, $\bar{\psi}_2$, и ψ_1, $\bar{\psi}_2$ и используя равенства: $W(e^{-ikx}, e^{ikx}) = 2ik$, $W(e^{\pm ikx}, e^{\pm ikx}) = 0$, мы придем к следующим соотношениям между коэффициентами A, B, C и D:

$$B = D, \tag{5}$$

$$|A|^2 + |B|^2 = 1, \tag{6}$$

$$|B|^2 + |C|^2 = 1, \tag{7}$$

$$A\bar{B} + B\bar{C} = 0. \tag{8}$$

(Например, в области I $W(\psi_1, \bar{\psi}_1) = -2ik(1 - A\bar{A})$, а в области II $W(\psi_1, \bar{\psi}_1) = -2ikB\bar{B}$. Приравнивая эти выражения, получим соотношение (6).)

Соотношения (5)—(8) показывают, что матрица S, составленная из коэффициентов A, $B = D$ и C

$$S = \begin{pmatrix} A & B \\ B & C \end{pmatrix},$$

является симметричной и унитарной. Эта матрица называется матрицей рассеяния или просто S-матрицей. Мы увидим в дальнейшем, что все физически интересные результаты могут

быть получены, если известна S-матрица, поэтому вычисление ее элементов является основной задачей одномерной теории рассеяния.

Рассмотрим вопрос о нормировке функций $\psi_1(k, x)$ и $\psi_2(k, x)$. Имеют место формулы

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(k_1, x)\overline{\psi_2(k_2, x)}\,dx = 0, \quad k_1 > 0, \quad k_2 > 0, \tag{9}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{1,2}(k_1, x)\overline{\psi_{1,2}(k_2, x)}\,dx = 2\pi\delta(k_1 - k_2), \tag{10}$$

т. е. справедливы те же соотношения, что и для функций e^{ikx} и e^{-ikx}, и нормировка не зависит от вида потенциала $V(x)$. Интегралы в формулах (9) и (10) понимаются в смысле главного значения. Мы проверим (10) для функции ψ_1. Остальные два соотношения проверяются так же. Подстановка функций $\psi_1(k_1, x)$ и $\overline{\psi_1(k_2, x)}$ в уравнение (2) приводит к равенствам

$$\psi''(k_1, x) + k_1^2\psi(k_1, x) = V(x)\psi(k_1, x), \tag{11}$$

$$\overline{\psi''(k_2, x)} + k_2^2\overline{\psi(k_2, x)} = V(x)\overline{\psi(k_2, x)}. \tag{12}$$

(Мы не пишем индекс 1 в обозначении решения ψ_1 для сокращения записи.) Домножая (11) на $\overline{\psi(k_2, x)}$, а (12) на $\psi(k_1, x)$ и вычитая первое из второго, получим

$$\frac{d}{dx} W\left(\psi(k_1, x), \overline{\psi(k_2, x)}\right) = (k_1^2 - k_2^2)\,\psi(k_1, x)\overline{\psi(k_2, x)}.$$

Интегрируя это равенство, будем иметь

$$\int_{-N}^{N} \psi(k_1, x)\overline{\psi(k_2, x)}\,dx = \frac{1}{k_1^2 - k_2^2} W\left(\psi(k_1, x), \overline{\psi(k_2, x)}\right)\Big|_{-N}^{N}. \tag{13}$$

Нас интересует предел в смысле обобщенных функций интеграла, стоящего в левой части (13), при $N \to \infty$. Уже из формулы (13) видно, что этот предел зависит только от вида решений в областях *I* и *II* (для случая инфинитных потенциалов только от асимптотики решений при $x \to \pm\infty$).

После простых вычислений получим

$$\int_{-N}^{N} \psi(k_1, x)\overline{\psi(k_2, x)}\,dx =$$

$$= -\frac{i}{k_1 - k_2}\left[\left(A(k_1)\overline{A(k_2)} + B(k_1)\overline{B(k_2)}\right)e^{i(k_1-k_2)N} - e^{-i(k_1-k_2)N}\right] -$$

$$- \frac{i}{k_1 + k_2}\left[\overline{A(k_2)}\,e^{-i(k_1+k_2)N} + \overline{A(k_1)}\,e^{i(k_1+k_2)N}\right]$$

Второе слагаемое по теореме Римана — Лебега стремится к нулю (в смысле обобщенных функций). Подобное утверждение несправедливо по отношению к первому слагаемому, так как оно сингулярно при $k_1 = k_2$. Сингулярная часть этого слагаемого не изменится, если заменить $\overline{A(k_2)}$ и $\overline{B(k_2)}$ на $\overline{A(k_1)}$ и $\overline{B(k_1)}$ соответственно *. Используя (6), имеем

$$\int_{-N}^{N} \psi_1(k_1, x)\overline{\psi_1(k_2, x)}\,dx = \frac{2}{k_1 - k_2}\sin(k_1 - k_2)N + F(k_1, k_2, N),$$

где

$$\lim_{N\to\infty} F(k_1, k_2, N) = 0.$$

Наконец, используя известную формулу

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\sin Nx}{x} = \pi\delta(x),$$

получим

$$\lim_{N\to\infty} \int_{-N}^{N} \psi_1(k_1, x)\overline{\psi_1(k_2, x)}\,dx = 2\pi\delta(k_1 - k_2),$$

что совпадает с (10).

§ 37. Физический смысл решений ψ_1 и ψ_2

Для того чтобы выяснить физический смысл решений ψ_1 и ψ_2, построим с их помощью решения нестационарного уравнения Шредингера

$$i\frac{d\varphi}{dt} = H\varphi,$$

Рассмотрим решение уравнения Шредингера, построенное по функции $\psi_1(k, x)$

$$\varphi_1(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty C(k)\,\psi_1(k, x)\,e^{-ik^2t}\,dk. \qquad (1)$$

Относительно функции $C(k)$ мы предположим, что она отлична от нуля в малой окрестности точки k_0. В этом случае $\varphi_1(x, t)$ имеет наиболее простой физический смысл. Кроме того, будем считать, что

$$\int_0^\infty |C(k)|^2\,dk = 1,$$

---

* Для этого достаточно, чтобы $A(k)$ и $B(k)$ были дифференцируемыми функциями от k, что может быть доказано.

тогда из (36.10) следует, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_1(x, t)|^2 dx = 1,$$

т. е. решение $\varphi_1(x, t)$ имеет правильную нормировку. Используя сосредоточенность функции $C(k)$ в окрестности точки k_0 и непрерывность функций $A(k)$ и $B(k)$, можно записать приближенные выражения * для функции $\varphi_1(x, t)$ в областях I и II:

$$I:\ \varphi_1(x, t) \cong \varphi_+(x, t) + A(k_0)\varphi_-(x, t),$$

$$II:\ \varphi_1(x, t) \cong B(k_0)\varphi_+(x, t),$$

где

$$\varphi_{\pm}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} C(k) e^{\pm ikx - ik^2t} dk. \tag{2}$$

Функции $\varphi_{\pm}(x, t)$ являются нормированными решениями уравнения Шредингера для свободной частицы и изучались ** в § 15. Там же были построены асимптотические выражения для этих решений при $t \to \pm\infty$

$$\varphi_{\pm}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2|t|}} C\left(\pm \frac{x}{2t}\right) e^{i\chi} + O\left(\frac{1}{|t|}\right),$$

где χ — вещественная функция, вид которой для нас несуществен. Из этого выражения видно, что функции $\varphi_{\pm}(x, t)$ при $|t| \to \infty$ отличны от нуля только в окрестности точек $x = \pm 2k_0t$. Поэтому φ_+ описывает состояние свободной частицы, движущейся слева направо со скоростью *** $v = 2k_0$, а φ_- — частицу, имеющую противоположное направление скорости (напомним, что $m = 1/2$).

Теперь легко понять, какими свойствами обладает решение $\varphi_1(x, t)$ при $t \to \pm\infty$. Пусть $t \to -\infty$. Тогда в областях I и II имеем

$$I:\ \varphi_1(x, t) = \varphi_+(x, t),$$

$$II:\ \varphi_1(x, t) = 0,$$

---

* Эти выражения можно считать сколько угодно точными, если интервал Δk, внутри которого $C(k)$ отлична от нуля, сколь угодно мал. Однако перейти к пределу, заменив $C(k)$ на δ-функцию, мы не можем, так как не получим квадратично интегрируемого решения уравнения Шредингера.

** Имеется несущественное различие в записи. Нам удобнее здесь считать $k > 0$, и знак импульса в экспоненте $e^{\pm ikx}$ выписывается явно. Кроме того, интегрирование в (2) можно распространить на всю вещественную ось, так как $C(k) = 0$ при $k < 0$.

*** Более точно: со скоростью $2k_0$ перемещается область, в которой отлична от нуля вероятность найти частицу.

так как при $t \to -\infty$ $\varphi_-(x,t)=0$ при $x<-a$ и $\varphi_+(x,t)=0$ при $x>a$. Аналогично при $t\to+\infty$

$$I:\ \varphi_1(x,\ t)=A(k_0)\,\varphi_-(x,\ t),$$

$$II:\ \varphi_1(x,\ t)=B(k_0)\,\varphi_+(x,\ t).$$

Мы видим, что задолго до рассеяния ($t\to-\infty$) частица с вероятностью, равной единице, находится слева от барьера и движется по направлению к барьеру со скоростью $2k_0$.

Вычислим вероятности W_I и W_{II} обнаружить частицу при $t\to+\infty$ в областях I и II соответственно. Имеем

$$W_I=\int_{-\infty}^{-a}|\varphi_1(x,\ t)|^2\,dx=|A(k_0)|^2\int_{-\infty}^{a}|\varphi_-(x,\ t)|^2\,dx=$$

$$=|A(k_0)|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_-(x,\ t)|^2\,dx=|A(k_0)|^2.$$

Замена области интегрирования I на всю вещественную ось возможна, так как при $t\to+\infty$ $\varphi_-(x,t)\neq 0$ только в области I. Точно так же проверяется, что

$$W_{II}=|B(k_0)|^2.$$

Графики функции $|\varphi_1(x,t)|^2$ как функции от x при $t\to\pm\infty$ изображены на рис. 12.

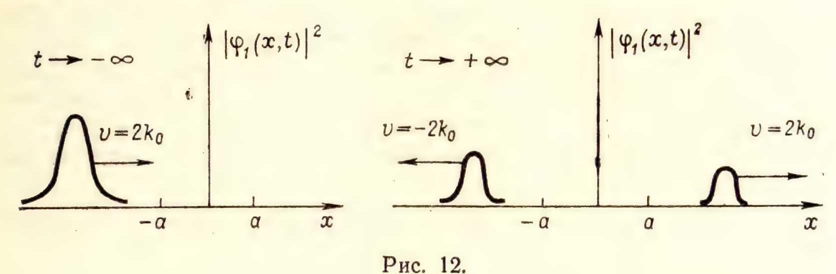


Рис. 12.

Таким образом, решение уравнения Шредингера $\varphi_1(x,t)$ описывает частицу, которая до рассеяния приближается к потенциальному барьеру со скоростью $2k_0$ и с вероятностью $|A(k_0)|^2$ отражается от барьера или с вероятностью $|B(k_0)|^2$ проходит через потенциальный барьер *.

Обратим внимание на то, что результат не зависит от вида функции $C(k)$, важно только, чтобы интервал Δk, в котором $C(k)$ отлична от нуля, был мал. Физически это требование понятно, если мы хотим экспериментально найти зависимость,

* В одномерной задаче понятие сечения теряет смысл. Всю информацию о рассеянии содержат вероятности $|A|^2$ и $|B|^2$.

например, коэффициента отражения $|A(k)|^2$ от k, должны использовать частицы, находящиеся в состоянии с возможно меньшей дисперсией k (состояний с нулевой дисперсией не существует). При конкретных расчетах коэффициентов отражения и прохождения $|A(k)|^2$ и $|B(k)|^2$ нет необходимости решать нестационарное уравнение Шредингера, достаточно найти решение $\psi_1(k, x)$. Заметим, что решение $\varphi_2(x, t)$, которое можно построить по функции $\psi_2(k, x)$, имеет такой же смысл, только частица приближается к барьеру справа.

Вспомним свойства матрицы рассеяния S. Равенство $B = D$ приводит к равенству вероятностей прохождения через барьер в противоположных направлениях и, как можно показать, является следствием инвариантности уравнения Шредингера относительно обращения времени. Равенства

$$|A|^2 + |B|^2 = 1, \quad |B|^2 + |C|^2 = 1$$

выражают закон сохранения вероятности. Действительно, нормировка решений $\varphi_1(x, t)$ и $\varphi_2(x, t)$ от времени не зависит, а при $t \to \infty$ имеем

$$\lim_{t \to \infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_1(x, t)|^2 dx = |A(k_0)|^2 + |B(k_0)|^2 = 1.$$

§ 38. Рассеяние на прямоугольном барьере

Рассмотрим конкретный пример задачи о рассеянии одномерной частицы на прямоугольном потенциальном барьере. Пусть

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leqslant a, \quad V_0 > 0, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Уравнение $H\psi = k^2\psi$ в этом случае в областях *I—III* имеет вид

$$\text{I и II:} \quad \psi'' + k^2\psi = 0,$$

$$\text{III:} \quad \psi'' + \alpha^2 \psi = 0, \tag{1}$$

где $\alpha = \sqrt{k^2 - V_0}$ (для определенности считаем, что $\alpha > 0$ при $k^2 - V_0 > 0$ и $-i\alpha > 0$ при $k^2 - V_0 < 0$).

Построим решение $\psi_1(k, x)$. Это решение в областях *I—III* имеет вид

$$\text{I:} \quad e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \tag{2}$$

$$\text{II:} \quad Be^{ikx}, \tag{3}$$

$$\text{III:} \quad me^{i\alpha x} + ne^{-i\alpha x}.$$

Коэффициенты A, B, m, n находятся из условий непрерывности функции ψ_1 и ее производной в точках $-a$ и a

$$e^{-ika} + Ae^{ika} = me^{-i\alpha a} + ne^{i\alpha a},$$
$$k(e^{-ika} - Ae^{ika}) = \alpha(me^{-i\alpha a} - ne^{i\alpha a}),$$
$$me^{i\alpha a} + ne^{-i\alpha a} = Be^{ika},$$
$$\alpha(me^{i\alpha a} - ne^{-i\alpha a}) = kBe^{ika}.$$

Выпишем выражение для коэффициента B

$$B = \left[\frac{(\alpha + k)^2}{4\alpha k} e^{2i(k-\alpha)a} - \frac{(\alpha - k)^2}{4\alpha k} e^{2i(k+\alpha)a}\right]^{-1}.$$

Нетрудно проверить, что $B \to 0$ при выполнении любого из условий:

$$1)\ k \to 0, \quad 2)\ V_0 \to \infty, \quad 3)\ a \to \infty,\ k^2 < V_0.$$

Наоборот, $B \to 1$ при выполнении одного из условий:

$$4)\ k \to \infty, \quad 5)\ V_0 \to 0, \quad 6)\ a \to 0.$$

Мы видим, что в предельных случаях 1)—5) результаты, полученные на основе квантовой механики, совпадают с классическими *. На рис. 13 приведен график функции $|B(k)|^2$. Из графика видно, что при некоторых конечных значениях k вероятность прохождения $|B|^2 = 1$. Интересно отметить, что уравнения (1) вместе с условиями (2) и (3) описывают прохождение световых волн через прозрачные пластинки. При этом $|B|^2$ и $|A|^2$ пропорциональны интенсивностям проходящей и отраженной волн. В случае $|B|^2 = 1$, $|A|^2 = 0$ отраженная волна отсутствует. Это явление используется для просветления оптики.

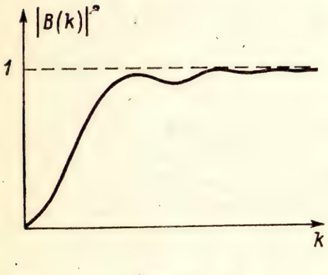


Рис. 13.

§ 39. Рассеяние на потенциальном центре

Для задачи о рассеянии на потенциальном центре оператор Шредингера имеет вид

$$H = -\Delta + V(\mathbf{x}). \tag{1}$$

(Мы снова считаем, что $m = 1/2$, $h = 1$). В дальнейшем мы обычно будем считать, что потенциал $V(\mathbf{x})$ — финитная функция

* Согласно классической механике частица с вероятностью единица проходит через барьер при $k^2 > V_0$ и с вероятностью единица отражается при $k^2 < V_0$.

($V(\mathbf{x})=0$ при $|\mathbf{x}|>a$). Изложение построим по той же схеме, что и в одномерном случае, т. е. сначала рассмотрим некоторые решения стационарного уравнения Шредингера, а затем выясним их физический смысл с помощью нестационарного уравнения Шредингера.

Наша первая задача — сформулировать асимптотическое (при $r\to\infty$) условие на решение уравнения

$$-\Delta\psi(\mathbf{x})+V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})=k^2\psi(\mathbf{x}),$$

которое соответствует физической картине рассеяния и является аналогом условий (36.4) для одномерной задачи. Естественно ожидать, что одно слагаемое асимптотически будет соответствовать частице, налетающей на рассеивающий центр по определенному направлению, а второе — соответствовать рассеянной частице, которая может иметь различные направления движения после рассеяния и удаляется от центра. Аналогами функций e^{ikx} и e^{-ikx} в трехмерном случае являются функции e^{ikr}/r и e^{-ikr}/r. Поэтому разумно предположить, что частице до и после рассеяния в асимптотике соответствуют слагаемые $\frac{e^{-ikr}}{r}\delta(\mathbf{n}+\boldsymbol{\omega})$ и $\frac{e^{ikr}}{r}S(k,\mathbf{n},\boldsymbol{\omega})$. Мы используем следующие обозначения: $\mathbf{k}$ — импульс налетающей частицы, $\boldsymbol{\omega}=\mathbf{k}/k$, $\mathbf{n}=\mathbf{x}/r$, $\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}_0)$ — δ-функция на единичной сфере, определяемая равенством

$$\int_{S_2} f(\mathbf{n})\,\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}_0)\,d\mathbf{n}=f(\mathbf{n}_0),\quad d\mathbf{n}=\sin\theta\,d\theta\,d\varphi,$$

$S(k,\mathbf{n},\boldsymbol{\omega})$ — некоторая функция, которая, как будет показано, содержит всю информацию о процессе рассеяния и которая должна быть найдена при решении задачи. Мы увидим в дальнейшем, что функция $S(k,\mathbf{n},\boldsymbol{\omega})$ является ядром некоторого унитарного оператора S, который называется оператором рассеяния.

Мы приходим к следующей постановке задачи о рассеянии на силовом центре: требуется найти решение уравнения

$$-\Delta\psi(\mathbf{x},\mathbf{k})+V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},\mathbf{k})=k^2\psi(\mathbf{x},\mathbf{k}),\tag{2}$$

которое при $r\to\infty$ имеет асимптотику

$$\psi(\mathbf{x},\mathbf{k})=\frac{e^{-ikr}}{r}\delta(\mathbf{n}+\boldsymbol{\omega})-\frac{e^{ikr}}{r}S(k,\mathbf{n},\boldsymbol{\omega})+o\left(\frac{1}{r}\right).\tag{3}$$

Обоснование такой постановки задачи может быть дано только при помощи нестационарного формализма теории рассеяния, это будет сделано в следующем параграфе. Вопрос о существовании решения уравнения (2) с условием (3) мы также обсудим ниже. На этот вопрос, однако, просто ответить для

случая $V(\mathbf{x}) = 0$. Покажем, что функция

$$\psi_0(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{k}{2\pi i} e^{i\mathbf{kx}} = \frac{k}{2\pi i} e^{ikr\mathbf{n}\boldsymbol{\omega}},$$

которая, очевидно, является решением (2) при $V(\mathbf{x}) = 0$, удовлетворяет и условию (3), и найдем вид функции $S(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega})$ для этого случая.

Мы ищем асимптотику функции $\psi_0(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ в классе обобщенных функций, поэтому должны найти асимптотическое выражение при $r \to \infty$ интеграла

$$I = \int_{S_2} f(\mathbf{n})\, \psi_0(r\mathbf{n}, k\boldsymbol{\omega})\, d\mathbf{n},$$

где $f(\mathbf{n})$ — гладкая функция. Используя явный вид $\psi_0(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ и вводя сферическую систему координат, полярная ось которой направлена по вектору $\boldsymbol{\omega}$, имеем

$$I = \frac{k}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} f(\cos\theta, \varphi)\, e^{ikr\cos\theta} \sin\theta\, d\theta =$$

$$= \frac{k}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\eta\, f(\eta, \varphi)\, e^{ikr\eta}.$$

Интегрируя по частям, получим

$$I = \frac{k}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\varphi\, \frac{1}{ikr}\, f(\eta, \varphi)\, e^{ikr\eta}\Big|_{-1}^{1} -$$

$$- \frac{k}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\varphi\, \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{1} d\eta\, f'_\eta(\eta, \varphi)\, e^{ikr\eta}.$$

Еще раз проинтегрировав по частям, легко убедиться, что второе слагаемое имеет порядок $O(1/r^2)$, поэтому

$$I = -\frac{1}{2\pi r} \int_0^{2\pi} d\varphi \left(e^{ikr} f(\boldsymbol{\omega}) - e^{-ikr} f(-\boldsymbol{\omega})\right) + O\left(\frac{1}{r^2}\right) =$$

$$= \frac{e^{-ikr}}{r} f(-\boldsymbol{\omega}) - \frac{e^{ikr}}{r} f(\boldsymbol{\omega}) + O\left(\frac{1}{r^2}\right).$$

Таким образом, мы показали, что

$$\psi_0(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{e^{-ikr}}{r}\, \delta(\mathbf{n} + \boldsymbol{\omega}) - \frac{e^{ikr}}{r}\, \delta(\mathbf{n} - \boldsymbol{\omega}) + O\left(\frac{1}{r^2}\right). \qquad (4)$$

Сравнивая (4) с (3), найдем функцию S для свободной частицы

$$S_0(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}) = \delta(\mathbf{n} - \boldsymbol{\omega}).$$

Используя (4), можно переписать асимптотическое условие (3) в форме

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{k}{2\pi i}\left(e^{ikr(\mathbf{n}, \omega)} + f(k, \mathbf{n}, \omega)\frac{e^{ikr}}{r}\right) + o\left(\frac{1}{r}\right), \tag{5}$$

где функция $f(k, \mathbf{n}, \omega)$ связана с функцией $S(k, \mathbf{n}, \omega)$ соотношением

$$S(k, \mathbf{n}, \omega) = \delta(\mathbf{n} - \omega) + \frac{ik}{2\pi} f(k, \mathbf{n}, \omega). \tag{6}$$

Функция $f(k, \mathbf{n}, \omega)$ называется амплитудой рассеяния. Очевидно, что $f(k, \mathbf{n}, \omega) = 0$ при $V(\mathbf{x}) = 0$. Мы увидим, что через эту функцию наиболее просто выражается сечение рассеяния.

Вместо асимптотического условия (5) часто используют

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{ikr\mathbf{n}\omega} + f(\mathbf{k}, \mathbf{n}, \omega)\frac{e^{ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r}\right), \tag{7}$$

которое приводит к более удобной нормировке функции $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$.

Посмотрим теперь, какими свойствами обладает функция $S(k, \mathbf{n}, \omega)$. Для изучения этих свойств удобным оказывается следующее вспомогательное утверждение.

Пусть функции $\psi_1(\mathbf{x})$ и $\psi_2(\mathbf{x})$ удовлетворяют уравнению (2) и асимптотическим условиям при $r \to \infty$, которые можно один раз дифференцировать по r

$$\psi_1(\mathbf{x}) = A_1(\mathbf{n})\frac{e^{-ikr}}{r} + B_1(\mathbf{n})\frac{e^{ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r}\right),$$

$$\psi_2(\mathbf{x}) = A_2(\mathbf{n})\frac{e^{-ikr}}{r} + B_2(\mathbf{n})\frac{e^{ikr}}{r} + o\left(\frac{1}{r}\right).$$

Тогда справедливо равенство

$$\int_{S_2} A_1(\mathbf{n}) B_2(\mathbf{n})\, d\mathbf{n} = \int_{S_2} A_2(\mathbf{n}) B_1(\mathbf{n})\, d\mathbf{n}. \tag{8}$$

Это утверждение легко доказывается при помощи формулы Грина

$$\int_{\Omega} (\psi_1\Delta\psi_2 - \psi_2\Delta\psi_1)\, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega}\left(\psi_1\frac{\partial\psi_2}{\partial n} - \psi_2\frac{\partial\psi_1}{\partial n}\right) d\Sigma. \tag{9}$$

В качестве области интегрирования Ω следует выбрать шар радиуса R и перейти к пределу при $R \to \infty$. Положим

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{e^{-ikr}}{r}\delta(\mathbf{n} + \omega) - \frac{e^{ikr}}{r} S(k, \mathbf{n}, \omega) + o\left(\frac{1}{r}\right),$$

$$\psi_2(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}') = \frac{e^{-ikr}}{r}\delta(\mathbf{n} + \omega') - \frac{e^{ikr}}{r} S(k, \mathbf{n}, \omega') + o\left(\frac{1}{r}\right),$$

$$\psi_3(\mathbf{x}) = \overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} = -\frac{e^{-ikr}}{r}\overline{S(k, \mathbf{n}, \omega')} + \frac{e^{ikr}}{r}\delta(\mathbf{n} + \omega') + o\left(\frac{1}{r}\right),$$

где $\mathbf{k}' = k\omega'$. Применяя формулу (8) к функциям ψ_1 и ψ_2, получим

$$S(k, -\omega, \omega') = S(k, -\omega', \omega),$$

или, заменяя ω на $-\omega$,

$$S(k, \omega, \omega') = S(k, -\omega', -\omega). \tag{10}$$

Эта формула является аналогом равенства $B = D$ для одномерной задачи рассеяния и выражает тот факт, что значения функции S для прямого $(\omega' \to \omega)$ и обращенного во времени $(-\omega \to -\omega')$ процессов столкновений совпадают. Можно показать, что это свойство (так же, как и симметрия S-матрицы в одномерном случае) является следствием инвариантности уравнения Шредингера относительно обращения времени.

Далее, применяя формулу (8) к функциям ψ_1 и ψ_3, получим

$$\int_{S_2} \overline{S(k, \mathbf{n}, \omega')}\, S(k, \mathbf{n}, \omega)\, dn = \delta(\omega - \omega'). \tag{11}$$

Если рассматривать функцию $S(k, \mathbf{n}, \omega)$ как ядро интегрального оператора в $L^2(S_2)$

$$S\varphi(\omega) = \int_{S_2} S(k, \omega, \omega')\, \varphi(\omega')\, d\omega',$$

то формула (11) может быть переписана в виде

$$S^*S = I.$$

Учитывая (10), из (11) следует, что справедливо равенство

$$SS^* = I.$$

Из последних двух соотношений следует, что оператор S является унитарным.

Мы видим, что оператор S для задачи рассеяния на потенциальном центре обладает теми же свойствами, что и S-матрица для одномерной задачи рассеяния. Из унитарности оператора S вытекает важное соотношение

$$\int_{S_2} |f(k, \mathbf{n}, \omega)|^2\, d\mathbf{n} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(k, \omega, \omega), \tag{12}$$

которое носит название оптической теоремы. Действительно, используя (6) и (11), получим

$$\int_{S_2} \left[\delta(\mathbf{n} - \omega') - \frac{ik}{2\pi} \overline{f(k, \mathbf{n}, \omega')}\right] \left[\delta(\mathbf{n} - \omega) + \frac{ik}{2\pi} f(k, \mathbf{n}, \omega)\right] d\mathbf{n} =$$

$$= \delta(\omega - \omega') + \frac{ik}{2\pi}\left[f(k, \omega', \omega) - \overline{f(k, \omega, \omega')}\right] +$$

$$+ \frac{k^2}{4\pi^2} \int_{S_2} f(k, \mathbf{n}, \omega,)\, \overline{f(k, \mathbf{n}, \omega')}\, d\mathbf{n} = \delta(\omega - \omega').$$

Полагая $\omega = \omega'$, мы сразу приходим к формуле (12).

В § 42 мы увидим, что интеграл в левой части (12) совпадает с полным сечением σ для рассеяния частицы на потенциальном центре. Поэтому (12) можно переписать в виде

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(k, \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega}).$$

Эта формула связывает полное сечение рассеяния с мнимой частью амплитуды рассеяния на нулевой угол.

Используя унитарность оператора S, легко показать, что функции $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$, удовлетворяющие асимптотическому условию (7), имеют нормировку

$$\int_{R^3} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} \, d\mathbf{x} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \qquad (13)$$

т. е. нормированы так же, как решения для свободной частицы $e^{i\mathbf{kx}}$. Чтобы проверить (13), умножим равенства

$$\Delta\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) + k^2\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}),$$

$$\Delta\overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} + k^2\overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} = V(\mathbf{x})\overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')}$$

на $\overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')}$ и $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ соответственно, вычтем первое из второго и проинтегрируем по шару радиуса R, тогда

$$\int_{\Omega_R} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} \, d\mathbf{x} = \frac{1}{k^2 - k'^2} \int_{\Omega_R} [\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \Delta\overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} - \overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} \Delta\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})] \, d\mathbf{x}.$$

С помощью формулы Грина это равенство можно переписать в виде

$$\int_{\Omega_R} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}') \, d\mathbf{x} = \frac{1}{k^2 - k'^2} \int_{S_R} \left(\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \frac{\partial\overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')}}{\partial r} - \overline{\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')} \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})}{\partial r} \right) d\Sigma,$$

где S_R — сфера радиуса R. Формула (13) получается из последнего соотношения переходом к пределу при $R \to \infty$, интеграл в правой части считается с помощью асимптотического выражения для $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$. Мы не приводим соответствующих выкладок, так как они буквально повторяют вычисления, которые привели нас к формулам (36.9), (36.10).

§ 40. Движение волновых пакетов в поле силового центра

Построим с помощью функции $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ решение нестационарного уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = H\psi(\mathbf{x}, t)$$

вида

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} C(\mathbf{k})\, \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})\, e^{-ik^2t}\, d\mathbf{k}. \tag{1}$$

Если функция $C(\mathbf{k})$ удовлетворяет условию

$$\int_{\mathbf{R}^3} |C(\mathbf{k})|^2\, d\mathbf{k} = 1, \tag{2}$$

то $\psi(\mathbf{x}, t)$ вследствие (39.13) имеет правильную нормировку

$$\int_{\mathbf{R}^3} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2\, d\mathbf{x} = 1.$$

Как и в одномерном случае, разумно рассмотреть решение с функцией $C(\mathbf{k})$, сосредоточенной в малой окрестности точки $\mathbf{k}_0 = k_0\boldsymbol{\omega}_0$. По теореме Римана — Лебега при $|t| \to \infty$ $\psi(\mathbf{x}, t) \to 0$ и $\int\limits_{\Omega} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2\, d\mathbf{x} \to 0$ для любой конечной области Ω. Поэтому функция $\psi(\mathbf{x}, t)$ описывает инфинитное движение частицы. Нас интересует поведение этого решения при $|t| \to \infty$ и $r \to \infty$ и мы можем заменить $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ в формуле (1) ее асимптотическим выражением

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \frac{2\pi i}{k}\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\,\delta(\mathbf{n}+\boldsymbol{\omega}) - \frac{e^{ikr}}{r}\, S(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega})\right) + o\left(\frac{1}{r}\right).$$

При $r \to \infty$ имеем

$$\psi(\mathbf{x}, t) \cong \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty k^2\, dk \int_{S_2} d\boldsymbol{\omega}\, C(k, \boldsymbol{\omega})\, \frac{2\pi i}{k}\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\,\delta(\mathbf{n}+\boldsymbol{\omega}) - \right.$$

$$\left. - \frac{e^{ikr}}{r}\, S(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega})\right) e^{-ik^2t} = \psi_1(\mathbf{x}, t) + \psi_2(\mathbf{x}, t),$$

где $\psi_1(\mathbf{x}, t)$ и $\psi_2(\mathbf{x}, t)$ соответствуют сходящейся e^{-ikr}/r и расходящейся e^{ikr}/r волне в асимптотике.

Функция $\psi_1(\mathbf{x}, t)$ может быть переписана в виде

$$\psi_1(\mathbf{x}, t) = \frac{i}{r\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} kC(k, -\mathbf{n})\, e^{-ikr} e^{-ik^2t}\, dk \tag{3}$$

(мы распространили интегрирование на всю вещественную ось, положив $C(k, \mathbf{n}) = 0$ при $k < 0$). Вычисляя интеграл (3) методом стационарной фазы, получим

$$\psi_1(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{|2t|}\right)^{\frac{3}{2}} C\left(-\frac{r}{2t}, -\mathbf{n}\right) e^{i\chi} + O\left(\frac{1}{|t|^2}\right); \tag{4}$$

через χ, как всегда, обозначена вещественная функция, которая нас не интересует.

Для того чтобы вычислить $\psi_2(\mathbf{x}, t)$, используем формулу (39.6) для функции S

$$\psi_2(\mathbf{x}, t) = -\frac{i}{r\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} kdk \int_{S_2} d\omega\, C(k, \omega)\Big[\delta(\mathbf{n}-\omega) + \frac{ik}{2\pi} f(k, \mathbf{n}, \omega)\Big] e^{ikr} e^{-ik^2 t} = -\frac{i}{r\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} kdk\Big[C(k, \mathbf{n}) + \frac{ik}{2\pi} C_1(k) f(k, \mathbf{n}, \omega_0)\Big] e^{i(kr-k^2 t)}. \quad (5)$$

Здесь мы ввели обозначение $C_1(k) = \int_{S_2} C(k, \omega)\, d\omega$ и, учитывая δ-образность функции $C(k, \omega)$, заменили функцию $f(k, \mathbf{n}, \omega)$ ее значением в точке $\omega = \omega_0$. Интеграл в (5) вычисляется методом стационарной фазы

$$\psi_2(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{|2t|}\right)^{\frac{3}{2}}\Big[C\left(\frac{r}{2t}, \mathbf{n}\right) + \frac{ir}{4\pi t} C_1\left(\frac{r}{2t}\right) f\left(\frac{r}{2t}, \mathbf{n}, \omega_0\right)\Big] e^{i\chi_1} + O\left(\frac{1}{|t|^2}\right).$$

Наконец, учитывая δ-образность функции $C_1(k)$ (она сосредоточена в окрестности точки k_0), получим

$$\psi_2(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{|2t|}\right)^{\frac{3}{2}}\Big[C\left(\frac{r}{2t}, \mathbf{n}\right) + \frac{ik_0}{2\pi} C_1\left(\frac{r}{2t}\right) f(k_0, \mathbf{n}, \omega_0)\Big] e^{i\chi_1} + O\left(\frac{1}{|t|^2}\right). \quad (6)$$

Из формул (4) и (6) видно, что ψ_1 дает вклад в $\psi(\mathbf{x}, t)$ только при $t \to -\infty$, а ψ_2 — только при $t \to +\infty$. Для плотности функции распределения координат $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ имеем

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \cong \frac{1}{8|t|^3}\left|C\left(-\frac{r}{2t}, -\mathbf{n}\right)\right|^2, \quad t \to -\infty, \quad (7)$$

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \cong \frac{1}{8|t|^3}\Big[\left|C\left(\frac{r}{2t}, \mathbf{n}\right)\right|^2 - \frac{k_0}{\pi}\,\mathrm{Im}\, C_1\left(\frac{r}{2t}\right)\overline{C\left(\frac{r}{2t}, \mathbf{n}\right)} \times f(k_0, \mathbf{n}, \omega_0) + \frac{k_0^2}{4\pi^2}\left|C_1\left(\frac{r}{2t}\right)\right|^2 |f(k_0, \mathbf{n}, \omega_0|^2\Big], \quad t \to +\infty. \quad (8)$$

Из формул (7) и (8) следует, что полученные асимптотические выражения для $\psi(\mathbf{x}, t)$ имеют правильную нормировку при $t \to \pm\infty$. (Проверка этого утверждения для случая $t \to -\infty$ тривиальна, а в случае $t \to +\infty$ следует использовать формулу (39.12).)

Вспоминая, что $C(k, \omega)$ отлична от нуля только в малой окрестности точки $k_0\omega_0$, а $C_1(k)$ — в малой окрестности точки k_0,

мы видим, что при $t \to -\infty$ плотность функции распределения координат $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ отлична от нуля в окрестности точки $r = -2k_0t$, $\mathbf{n} = -\boldsymbol{\omega}_0$. При $t \to +\infty$ плотность $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ отлична от нуля внутри тонкого сферического слоя радиуса $r = 2k_0t$. Угловое распределение вероятности можно получить *, проинтегрировав (8) по переменной r с весом r^2. Ясно, что первые два слагаемых в (8) дают вклад в это распределение только при направлениях, близких к $\boldsymbol{\omega}_0$. Угловое распределение по всем остальным направлениям пропорционально $|f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0)|^2$.

Теперь мы легко можем представить, как происходит движение частицы в состоянии, описываемом функцией $\psi(\mathbf{x}, t)$. Задолго до рассеяния ($t \to -\infty$) частица со скоростью $2k_0$

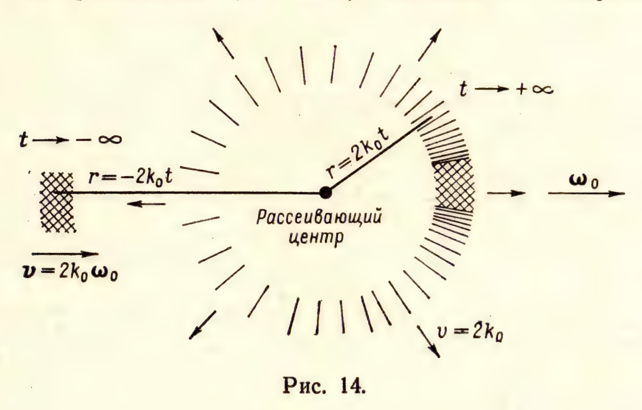


Рис. 14.

приближается к рассеивающему центру, двигаясь по направлению $\boldsymbol{\omega}_0$. После рассеяния ($t \to +\infty$) частица удаляется от рассеивающего центра с той же скоростью, причем она может быть обнаружена в любой точке сферического слоя радиуса $r = 2k_0t$ с вероятностным распределением по углам, зависящем от $C(\mathbf{k})$ и $f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0)$. На рис. 14 заштрихованы области, в которых велика вероятность обнаружить частицу при $t \to \pm\infty$. Крест-накрест заштрихованы области, в которых эта вероятность отлична от нуля и при отсутствии рассеивающего центра.

Три слагаемых в формуле (8) допускают следующее толкование. Интеграл по всему пространству от суммы первых двух слагаемых W_1 есть вероятность того, что частица пройдет мимо

---

* Мы не выписываем точных формул для углового распределения вероятности, так как оно существенно зависит от вида функции $C(\mathbf{k})$ и поэтому не является удобной характеристикой процесса рассеяния (функция $C(\mathbf{k})$, соответствующая конкретному эксперименту по рассеянию, никогда не известна). Подходящей характеристикой является сечение. Как мы увидим, сечение оказывается нечувствительным к виду $C(\mathbf{k})$, важно только, чтобы эта функция была сосредоточена в малой окрестности точки $\mathbf{k}_0$. Физически это требование означает, что импульс налетающей частицы должен быть почти задан.

силового центра без рассеяния. Эта вероятность меньше единицы за счет второго слагаемого. Интеграл от третьего слагаемого W_2 есть вероятность рассеяния. Мы уже упоминали, что асимптотическое выражение (6) для $\psi(\mathbf{x}, t)$ имеет правильную нормировку, поэтому

$$W_1 + W_2 = 1.$$

Мы видим, что решение уравнения Шредингера $\psi(\mathbf{x}, t)$, построенное при помощи функции $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$, правильно описывает физическую картину рассеяния. Это оправдывает выбор асимптотического условия для функции $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$.

Отметим еще некоторые особенности решения $\psi(\mathbf{x}, t)$. Нетрудно видеть, что при $t \to -\infty$ эта функция имеет такую же асимптотику, как и решение уравнения Шредингера для свободной частицы

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} C(\mathbf{k})\, e^{i(\mathbf{kx} - k^2 t)}\, d\mathbf{k}.$$

(Здесь $C(\mathbf{k})$ та же функция, что и в интеграле (1).) Действительно, расходящиеся волны e^{ikr}/r не дают вклада в асимптотику при $t \to -\infty$, а коэффициенты при e^{-ikr}/r в асимптотическом выражении для функций $e^{i\mathbf{kx}}$ и $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ совпадают.

Покажем, что и при $t \to +\infty$ решение $\psi(\mathbf{x}, t)$ асимптотически стремится к некоторому решению уравнения Шредингера для свободной частицы. Учитывая, что при $t \to +\infty$ сходящиеся волны e^{-ikr}/r не дают вклада в асимптотику, получим

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbf{R}^3} C(\mathbf{k})\, \psi(\mathbf{x}, k)\, e^{-ik^2 t}\, d\mathbf{k} \cong$$

$$\cong -\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_0^\infty k^2\, dk \int\limits_{S_2} d\omega\, C(k, \omega) \frac{2\pi i}{k} S(k, \mathbf{n}, \omega) \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik^2 t} =$$

$$= -\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_0^\infty k^2\, dk \int\limits_{S_2} d\omega \int\limits_{S_2} d\omega' \,\frac{2\pi i}{k} S(k, \omega', \omega)\, C(k, \omega)\, \delta(\omega' - \mathbf{n}) \times$$

$$\times \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik^2 t} = -\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_0^\infty k^2\, dk \int\limits_{S_2} d\omega' \,\frac{2\pi i}{k} \widetilde{C}(k, \omega')\, \delta(\omega' - \mathbf{n}) \times$$

$$\times \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik^2 t} \cong \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{R^3} \widetilde{C}(\mathbf{k})\, e^{i(\mathbf{kx} - k^2 t)}\, d\mathbf{k} = \widetilde{\varphi}(\mathbf{x}, t).$$

Здесь

$$\widetilde{C}(\mathbf{k}) = \widetilde{C}(k, \omega) = \int\limits_{S_2} S(k, \omega, \omega')\, C(k, \omega')\, d\omega'. \tag{9}$$

Мы видим, что решение уравнения Шредингера $\psi(\mathbf{x}, t)$ асимптотически стремится к решению $\tilde{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ для свободной частицы при $t \to \infty$. Функция $\tilde{C}(\mathbf{k})$, определяющая конечное состояние свободного движения, получается из функции $C(\mathbf{k})$, задающей начальное состояние, в результате действия оператора S. Унитарность оператора S обеспечивает правильную нормировку $\tilde{\varphi}(\mathbf{x}, t)$, так как вследствие унитарности

$$\int_{\mathbf{R}^3} |\tilde{C}(\mathbf{k})|^2 d\mathbf{k} = 1.$$

§ 41. Интегральное уравнение теории рассеяния

Основу большинства подходов для построения решений $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ и амплитуды рассеяния $f(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega})$ составляет интегральное уравнение

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, \mathbf{k})\, d\mathbf{y}, \tag{1}$$

которое часто называют уравнением Липпмана — Швингера.

Проверим, что решение этого уравнения удовлетворяет уравнению (39.2) и асимптотическому условию (39.7)*. Действительно, используя формулы

$$(\Delta + k^2) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} = 0, \quad (\Delta + k^2) e^{ikr}/r = -4\pi\delta(\mathbf{x}),$$

получим

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = 0 + \int_{\mathbf{R}^3} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) V(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, \mathbf{k})\, d\mathbf{y} = V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}).$$

Асимптотическое условие проверим для случая финитного потенциала ($V(\mathbf{x}) = 0$ при $r > a$). Имеем

$$\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = \frac{1}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right), \quad r = |\mathbf{x}|, \quad |\mathbf{y}| < a,$$

$$|\mathbf{x}-\mathbf{y}| = r\sqrt{1 - \frac{2\mathbf{x}\mathbf{y}}{r^2} + \frac{y^2}{r^2}} = r - \mathbf{n}\mathbf{y} + O\left(\frac{1}{r}\right),$$

$$e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = e^{i(kr - k\mathbf{n}\mathbf{y})} + O\left(\frac{1}{r}\right).$$

Поэтому для функции $\psi(x, k)$ получим

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-ik\mathbf{n}\mathbf{y}} V(\mathbf{y}) \psi(\mathbf{y}, \mathbf{k})\, d\mathbf{y} + O\left(\frac{1}{r^2}\right).$$

Сравнивая последнюю формулу с (39.7), мы видим, что решение интегрального уравнения имеет правильную асимптотику,

* Можно, конечно, проверить и обратное утверждение.

и, кроме того, получаем

$$f(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^3} e^{-ik\mathbf{nx}} V(\mathbf{x})\,\psi(\mathbf{x}, k\boldsymbol{\omega})\,d\mathbf{x}. \qquad (2)$$

Формула (2), в которой амплитуда рассеяния выражена через решение уравнения (1), часто оказывается полезной для приближенного нахождения $f(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega})$.

Один из приближенных методов теории рассеяния основан на использовании ряда итераций уравнения (1)

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi^{(n)}(\mathbf{x}, \mathbf{k}), \qquad (3)$$

где

$$\psi^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{kx}}, \quad \psi^{(n+1)}(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^3} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} V(\mathbf{y})\,\psi^{(n)}(\mathbf{y}, \mathbf{k}).$$

Ряд (3) называется борновским рядом, подстановка (3) в (2) дает борновский ряд для амплитуды рассеяния. Борновский ряд для задачи рассеяния на потенциальном центре хорошо изучен. Известно, например, что он сходится при условии

$$\max_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{R}^3} |V(\mathbf{y})| \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\,d\mathbf{y} < 4\pi.$$

Известно также, что при этом условии на потенциал оператор H не имеет дискретного спектра. Если дискретный спектр присутствует, то ряд (3) сходится не при всех k. В то же время при достаточно больших k ряд (3) сходится для весьма широкого класса потенциалов.

Простейшее приближение для амплитуды рассеяния получится, если в (2) вместо $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ подставить $\psi^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{kx}}$

$$f_B(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{\mathbf{R}^3} e^{-ik\mathbf{nx}} V(\mathbf{x})\, e^{ik\boldsymbol{\omega}\mathbf{x}}\,d\mathbf{x}.$$

Это приближение называется борновским приближением. Точное утверждение состоит в том, что при больших k

$$f(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}) - f_B(k, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}) = o(1)$$

равномерно по $\mathbf{n}$ и $\boldsymbol{\omega}$.

Интегральное уравнение используется для математического изучения задачи о рассеянии. При подходящем выборе функционального пространства это уравнение может быть сведено к уравнению второго рода

$$\psi = \varphi + A\psi$$

с вполне непрерывным оператором. Поэтому для уравнения (1) справедливы теоремы Фредгольма. Для широкого класса потенциалов показано, что соответствующее однородное уравнение может иметь решения лишь при мнимых значениях параметра k ($k_n = i\varkappa_n$, $\varkappa_n > 0$). Буквально повторяя вычисления, приведенные в начале этого параграфа, легко убедиться, что решение $\psi_n(\mathbf{x})$ однородного уравнения удовлетворяет уравнению Шредингера $[-\Delta + V(\mathbf{x})]\psi_n(\mathbf{x}) = -\varkappa_n^2\psi_n(\mathbf{x})$ и имеет асимптотику $\psi_n(\mathbf{x}) \cong f(\mathbf{n})e^{-\varkappa_n r}/r$, где $f(\mathbf{n})$ — некоторая функция, определенная на единичной сфере. Это значит, что решения однородного уравнения являются собственными функциями дискретного спектра оператора H. С помощью интегрального уравнения (1) была доказана полнота набора собственных функций $\{\psi_n(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})\}$ оператора H.

§ 42. Вывод формулы для сечения

Основной характеристикой процесса рассеяния частицы на потенциальном центре является дифференциальное сечение. В согласии с общим определением сечения дифференциальное сечение $d\sigma$ определяется формулой

$$d\sigma = \frac{dN}{I}, \tag{1}$$

где dN — вероятность обнаружить частицу после рассеяния ($t \to \infty$) в элементе телесного угла $d\mathbf{n}$, построенного около некоторого направления $\mathbf{n}$; I — вероятность пересечения свободной частицей площадки единичной площади, ориентированной перпендикулярно движению частицы. Эта вероятность определяется в той точке, где находится рассеивающий центр. Обратим внимание на то, что dN есть характеристика частицы в поле рассеивающего центра, а I — характеристика свободной частицы.

О состоянии ω свободной частицы пучка известно довольно мало. Действительно, известно, что частица имеет импульс, приближенно равный $\mathbf{k}_0 = k_0\boldsymbol{\omega}_0$, известна дисперсия импульса $(\Delta k)^2_{\text{ср}} = (\Delta k_1)^2_{\text{ср}} + (\Delta k_2)^2_{\text{ср}} + (\Delta k_3)^2_{\text{ср}}$; причем для того чтобы опыты по рассеянию допускали простую интерпретацию, стремятся использовать пучки частиц с малой дисперсией импульса. О координатах частицы пучка известно обычно совсем мало. Но все же известно, что в некоторый момент времени (который можно принять за $t = 0$) частица находится в макроскопической области, расположенной между ускорителем и мишенью; поперечные размеры этой области можно отождествить с диаметром пучка. Заметим, что существование такой области накладывает согласно соотношению неопределенностей Гейзенберга ограничения на дисперсию импульса снизу.

При выводе формулы для дифференциального сечения мы сделаем два предположения относительно малости корня из дисперсии импульса, который будем обозначать через Δk:

1) $\Delta k \ll k_0$,

2) $|f(k, \mathbf{n}, \omega) - f(k', \mathbf{n}, \omega')| \ll |f(k, \mathbf{n}\omega)|$, если $|k\omega - k'\omega'| < \Delta k$.

В принципе этим требованиям всегда можно удовлетворить, если $f(k, \mathbf{n}, \omega)$ — непрерывная функция от $\mathbf{k} = k\omega$ (непрерывность функции f может быть доказана для широкого класса потенциалов). Обычно на практике эти условия выполняются. Однако встречаются случаи, когда при малом изменении переменной $\mathbf{k}$ происходит сильное изменение функции $f(k, \mathbf{n}, \omega)$ (случай узкого резонанса). Величина Δk в конечном счете определяется конструкцией ускорителя и практически не может быть сделана как угодно малой. Поэтому в некоторых экспериментах условие 2) может не выполняться. В этом случае нельзя применять полученную ниже формулу для сечения.

Покажем, что при выполнении условий 1) и 2) дифференциальное сечение зависит от состояния налетающей частицы только через k_0 и справедлива формула

$$d\sigma = |f(k_0, \mathbf{n}, \omega_0)|^2 dn.$$

Наиболее общим состоянием для свободной частицы является смешанное, задаваемое матрицей плотности $M_0(t)$, которую мы представим в виде выпуклой комбинации чистых состояний

$$M_0(t) = \sum_S \alpha_s P_{\varphi_s(t)}, \quad \sum \alpha_s = 1.$$

Чистое состояние $P_{\varphi_s(t)}$ определяется волновой функцией $\varphi_s(\mathbf{x}, t)$, имеющей вид

$$\varphi_s(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{R^3} C_s(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{kx} - k^2 t)} d\mathbf{k}.$$

Можно утверждать, что заметный вклад дают только такие чистые состояния, дисперсия импульса в которых не превосходит дисперсии импульса в состоянии $M_0(t)$. Поэтому мы будем считать, что все функции $C_s(\mathbf{k})$ отличны от нуля лишь в малой окрестности точки $k_0 = k_0\omega_0$ и диаметр этой окрестности не превосходит Δk. Мы не имеем никакой информации ни о конкретном виде функций* $C_s(\mathbf{k})$, ни о весах α_s и не будем делать относительно них каких-либо предположений.

---

* Разным функциям $C_s(\mathbf{k})$ соответствует как различная форма, так и различное расположение волновых пакетов в конфигурационном пространстве в некоторый момент времени. Пусть, например, некоторая функция $C_s(\mathbf{k})$ задает волновой пакет, центр тяжести которого $(\mathbf{x}(t))_{\text{ср}}$ движется вдоль оси x_3, направленной по вектору ω_0 и проходящей через рассеивающий центр. Тогда функции $C_l(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{ku}_l} C_s(\mathbf{k})$ будет соответствовать пакет, сме-

Вычислим сначала вероятность I. Выберем систему координат с началом в силовом центре и осью x_3, направленной по вектору ω_0. Для чистого состояния $\varphi_s(t)$ вероятность $I^{(s)}$ проще всего вычислить, используя вектор плотности потока вероятности

$$\mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}, t) = i(\varphi_s \nabla \bar{\varphi}_s - \bar{\varphi}_s \nabla \varphi_s),$$

тогда

$$I^{(S)} = \int_{-\infty}^{\infty} j_3^{(s)}(\mathbf{x}, t)\Big|_{\mathbf{x}=0} dt.$$

Вычисляя

$$j_3^{(s)}(\mathbf{x}, t)\Big|_{x=0} = i\left(\varphi_s \frac{\partial \bar{\varphi}_s}{\partial x_3} - \bar{\varphi}_s \frac{\partial \varphi_s}{\partial x_3}\right)\Big|_{\mathbf{x}=0} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' \left(k_3 + k_3'\right) C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} e^{i(k'^2 - k^2)t},$$

получим

$$I^{(s)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(k_3 + k_3'\right) C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} e^{i(k'^2 - k^2)t} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' \left(k_3 + k_3'\right) C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} \delta\left(k'^2 - k^2\right) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' \frac{k_3 + k_3'}{2k} C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} \delta(k' - k) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' C_s(\mathbf{k}) C_s(\mathbf{k}') \delta(k' - k).$$

При вычислениях использовано равенство

$$\delta(k^2 - k'^2) = \frac{1}{2k}(\delta(k - k') + \delta(k + k')) \qquad (2)$$

и условие $\Delta k \ll k_0$, которое позволяет заменить $(k_3 + k_3')/2k$ на 1. Второе слагаемое в формуле (2) вклада в интеграл не дает, так как в области интегрирования $k > 0$ и $k' > 0$.

Для смешанного состояния $M_0(t)$, очевидно,

$$I = \sum_s \alpha_s \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' C_s(\mathbf{k}) C_s(\mathbf{k}') \delta(k - k').$$

щенный на вектор $\mathbf{u}_l$ в конфигурационном пространстве ($e^{i\mathbf{k}\mathbf{u}}$ — это оператор сдвига, записанный в импульсном представлении). Классическим аналогом состояния $\varphi_s(\mathbf{x}, t)$ (хотя и не вполне точным) можно считать состояние частицы, движущейся по прямолинейной траектории, проходящей через рассеивающий центр. Состоянию $\varphi_l(\mathbf{x}, t)$ тогда соответствует траектория, проходящая на расстоянии $\boldsymbol{\rho}$ от рассеивающего центра, равному проекции вектора $\mathbf{u}_l$ на плоскость поперечного сечения пучка. В классической теории рассеяния расстояние $\boldsymbol{\rho}$, на котором прошла бы частица от центра, если бы не было взаимодействия, называется прицельным параметром.

Вычислим теперь dN. При вычислении мы должны использовать матрицу плотности $M(t)$, описывающую состояние, которое задолго до рассеяния $(t \to -\infty)$ асимптотически стремится к $M_0(t)$. Оператор $M(t)$ можно записать в виде

$$M(t) = \sum_s \alpha_s P_{\psi_s(t)},$$

где чистые состояния $P_{\psi_s(t)}$ определены волновыми функциями

$$\psi_s(t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} C_s(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) e^{-ik^2t}. \quad (3)$$

Плотность функции распределения координат в чистом состоянии $P_{\psi_s(t)}$ есть $|\psi_s(\mathbf{x}, t)|^2$ и для вероятности $dN^{(s)}$ обнаружить частицу при $t \to \infty$ в элементе телесного угла $d\mathbf{n}$ в состоянии $P_{\psi_s(t)}$ получим

$$dN^{(s)} = \lim_{t \to +\infty} d\mathbf{n} \int_0^\infty r^2\, dr\, |\psi_s(\mathbf{x}, t)|^2. \quad (4)$$

Мы знаем, что при $t \to \infty$ частица уходит на бесконечность, поэтому при подстановке (3) в (4) можно заменить $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ ее асимптотическим выражением, тогда

$$dN^{(s)} = \lim_{t \to +\infty} d\mathbf{n} \int_0^\infty r^2\, dr \left| \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} C_s(\mathbf{k}) \times \right.$$
$$\left. \times \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f(k, \mathbf{n}, \omega) \frac{e^{ikr}}{r}\right) e^{-ik^2t} \right|^2.$$

Функция $\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} - ik^2t}$ является волновым пакетом для свободной частицы и отлична от нуля только в той части конфигурационного пространства, где конечна вероятность обнаружить нерассеянную частицу пучка, т. е. внутри узкого конуса, построенного около направления ω_0. Для всех остальных направлений вклад дает только расходящаяся волна и для таких направлений

$$dN^{(s)} = \lim_{t \to +\infty} \frac{d\mathbf{n}}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dr \left| \int_{\mathbf{R}^3} C_s(\mathbf{k}) f(k, \mathbf{n}, \omega) e^{ikr - ik^2t}\, d\mathbf{k} \right|^2. \quad (5)$$

Используя условие 2), можно заменить функцию $f(k, \mathbf{n}, \omega)$ под знаком интеграла ее значением в точке $k = k_0$, $\omega = \omega_0$ и вынести за знак интеграла. Далее интеграл $\int_{\mathbf{R}^3} C_s(\mathbf{k}) e^{ikr - ik^2t}\, d\mathbf{k}$ после интегрирования по угловым переменным вектора $\mathbf{k}$ становится

одномерным волновым пакетом и как функция от r при $t \to \infty$ он отличен от нуля только при больших положительных r. Поэтому интегрирование по r в (5) можно распространить на всю вещественную ось. Тогда

$$dN^{(s)} = \lim_{t \to +\infty} \frac{d\mathbf{n}}{(2\pi)^3} | f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0) |^2 \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dr \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} e^{i(k-k')r} e^{-i(k^2-k'^2)t} =$$

$$= d\mathbf{n} | f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0) |^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} \delta(k-k').$$

Наконец, для смешанного состояния $M(t)$

$$dN = d\mathbf{n} | f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0) |^2 \sum_s \alpha_s \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k} \int_{\mathbf{R}^3} d\mathbf{k}' C_s(\mathbf{k}) \overline{C_s(\mathbf{k}')} \delta(k-k')$$

или

$$dN = d\mathbf{n} | f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0) |^2 I,$$

откуда сразу получаем

$$d\sigma = | f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0) |^2 d\mathbf{n}. \qquad (6)$$

В заключение заметим, что мы получили формулу (6) для всех направлений $\mathbf{n}$, за исключением $\mathbf{n} = \boldsymbol{\omega}_0$. Сечение рассеяния вперед не может быть определено формулой (1), так как вероятность обнаружить частицу при $t \to \infty$ в телесном угле $d\mathbf{n}$, построенном около направления $\mathbf{n} = \boldsymbol{\omega}_0$, не пропорциональна I (кроме того, мы вообще не можем отличить частицу, рассеянную вперед, от нерассеянной частицы). Когда говорят о сечении рассеяния вперед, всегда подразумевают экстраполяцию на нулевой угол сечений рассеяния на малые углы. При таком понимании для сечения рассеяния вперед справедлива формула (6).

Для многих задач удобной характеристикой рассеяния оказывается полное сечение, которое определяется формулой *

$$\sigma = \int_{S_2} | f(k_0, \mathbf{n}, \boldsymbol{\omega}_0) |^2 d\mathbf{n}.$$

§ 43. Абстрактная теория рассеяния

В этом параграфе мы будем строго придерживаться следующих обозначений. Оператор Шредингера для свободной частицы обозначается через H_0, оператор Шредингера частицы

* В классической механике полное сечение $\sigma = \infty$, если потенциал не является финитным. Особенностью квантовой механики является конечность сечения σ для достаточно быстро убывающих потенциалов.

в поле через H

$$H = H_0 + V,$$

где V — оператор потенциальной энергии. Любое решение нестационарного уравнения Шредингера для частицы в поле обозначается через $\psi(t)$. Этот вектор однозначно определяется своим значением при $t = 0$, которое мы обозначаем через ψ, т. е.

$$\psi(t) = e^{-iHt}\psi,$$

(напомним, что e^{-iHt} — оператор эволюции).

Аналогично любое решение уравнения Шредингера для свободной частицы обозначается символом $\varphi(t)$, а его значение при $t = 0$ через φ,

$$\varphi(t) = e^{-iH_0t}\varphi.$$

Различные решения $\varphi(t)$ могут снабжаться дополнительными индексами. Соответствующие векторам $\psi(t)$, ψ, $\varphi(t)$, φ волновые функции будут записываться как $\psi(\mathbf{x}, t)$, $\psi(\mathbf{x})$, $\varphi(\mathbf{x}, t)$, $\varphi(\mathbf{x})$ в координатном представлении и $\psi(\mathbf{p}, t)$, $\psi(\mathbf{p})$, $\varphi(\mathbf{p}, t)$, $\varphi(\mathbf{p})$ в импульсном представлении. Наконец, собственные векторы оператора H (если они существуют) будем обозначать через χ_n, $H\chi_n = E_n\chi_n$.

В § 40 мы построили решение уравнения Шредингера $\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-iHt}\psi(\mathbf{x})$, которое при $t \to \mp\infty$ асимптотически стремилось к некоторым решениям уравнения Шредингера для свободной частицы $\varphi_\mp(\mathbf{x}, t) = e^{-iH_0t}\varphi_\mp(\mathbf{x})$, поэтому можно ожидать, что для такого решения $\psi(t)$ справедливы равенства

$$\lim_{t\to\mp\infty} \| e^{-iHt}\psi - e^{-iH_0t}\varphi_\mp \| = 0. \qquad (1)$$

Физическую картину рассеяния можно представлять следующим образом. Задолго до рассеяния частица свободно движется вдали от рассеивающего центра, затем она попадает в зону действия потенциала (происходит рассеяние) и, наконец, через достаточно большой промежуток времени движение частицы снова становится свободным. Поэтому естественной представляется следующая постановка нестационарной задачи о рассеянии:

1. По произвольному вектору φ_- из пространства состояний $\mathcal{H}$ построить вектор ψ такой, что (1) справедливо при $t \to -\infty$.

2. По построенному вектору ψ найти вектор $\varphi_+ \in \mathcal{H}$ такой, что (1) справедливо при $t \to +\infty$.

Вектор $\psi(t) = e^{-iHt}\psi$ описывает такое состояние частицы, которое в далеком прошлом совпадает с $\varphi_-(t) = e^{-iH_0t}\varphi_-$ и при $t \to +\infty$ переходит в $\varphi_+(t) = e^{-iH_0t}\varphi_+$. Физика интересует связь между векторами φ_- и φ_+. Поэтому к пунктам 1 и 2 постановки задачи можно добавить следующее.

3. Показать, что существует такой унитарный оператор S, что

$$\varphi_+ = S\varphi_-.$$

Начнем с пункта 1. Поставим задачу несколько шире и посмотрим, возможно ли по произвольным векторам $\varphi_- \in \mathscr{H}$ и $\varphi_+ \in \mathscr{H}$ построить такие векторы ψ, что (1) справедливо при $t \to -\infty$ и $t \to +\infty$ соответственно (разумеется, векторы ψ, построенные по φ_- и по φ_+, не обязаны совпадать).

Переписывая (1) с учетом унитарности оператора e^{-iHt} в виде

$$\lim_{t \to \mp\infty} \| \psi - e^{iHt} e^{-iH_0 t} \varphi_\mp \| = 0,$$

мы видим, что поставленный вопрос сводится к существованию сильных пределов

$$\lim_{t \to \pm\infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t} = U_\pm. \tag{2}$$

Операторы $U_\pm$, если они существуют, называются волновыми операторами. Если построен оператор U_-, то вектор $\psi = U_- \varphi_-$ удовлетворяет пункту 1 постановки задачи.

Найдем простое достаточное условие существования волновых операторов. Рассмотрим оператор

$$U(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t},$$

вычислим его производную *

$$\frac{dU(t)}{dt} = ie^{iHt}(H - H_0) e^{-iH_0 t} = ie^{iHt} V e^{-iH_0 t}.$$

Очевидно, что $U(0) = I$, поэтому

$$U(t) = I + i \int_0^t e^{iHt} V e^{-iH_0 t} dt,$$

$$U_\pm = I + i \int_0^{\pm\infty} e^{iHt} V e^{-iH_0 t} dt. \tag{3}$$

Вопрос о существовании операторов $U_\pm$ мы свели к вопросу о сходимости интегралов (3) на верхнем пределе. Достаточным условием сходимости (3) является существование интегралов

$$\int_0^{\pm\infty} \| V e^{-iH_0 t} \varphi \| dt \tag{4}$$

для любого $\varphi \in \mathscr{H}$ (мы учли унитарность оператора e^{iHt}). Наконец, интегралы (4) сходятся на верхних пределах, если для

---

* Обратим внимание на запись производной, которая учитывает некоммутативность H и H_0.

любого $\varphi \in \mathscr{H}$

$$\| V e^{-iH_0 t} \varphi \| = o\left(\frac{1}{|t|^{1+\varepsilon}}\right), \quad \varepsilon > 0, \quad |t| \to \infty. \tag{5}$$

Посмотрим, для каких потенциалов выполняется (5). В координатном представлении мы имеем оценку* для волновой функции $\varphi(\mathbf{x}, t) = e^{-iH_0 t}\varphi(\mathbf{x})$

$$|\varphi(\mathbf{x}, t)| < \frac{C}{|t|^{\frac{3}{2}}}$$

равномерно относительно $\mathbf{x}$. Тогда

$$\| V e^{-iH_0 t}\varphi \|^2 = \int_{R^3} |V(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} < \frac{C}{|t|^3}\int_{R^3} |V(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}.$$

Мы видим, что условие (5) выполняется, если потенциал квадратично интегрируемая функция. Разумеется, это условие не является необходимым. Класс потенциалов, для которых существуют $U_{\pm}$, шире, но существуют потенциалы, для которых нельзя построить волновые операторы. Важнейшим примером такого потенциала является кулоновский потенциал $V(r) = \alpha/r$. Причиной отсутствия волновых операторов для кулоновского потенциала является его слишком медленное убывание на бесконечности. Решения уравнения Шредингера для кулоновского потенциала не стремятся к решениям для свободной частицы при $t \to \pm\infty$ (частица «чувствует» потенциал даже на бесконечности). В связи с этим и нестационарная, и стационарная постановки задачи о рассеянии в кулоновском поле требуют серьезной модификации. Асимптотический вид кулоновских функций $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ отличен от (39.7).

Вернемся к рассмотрению потенциалов, для которых существуют волновые операторы $U_{\pm}$ и обсудим пункт 2. Можно поставить такой вопрос: для любого ли вектора $\psi \in \mathscr{H}$ найдутся векторы φ_+ и φ_- такие, что (1) справедливо при $t \to \pm\infty$.

Оказывается, что если у оператора H существуют собственные векторы χ_n, $\|\chi_n\| = 1$, то для них равенство (1) несправедливо ни при каких φ_+ и φ_-. Действительно, в этом случае легко можно сосчитать для произвольного $\varphi \in \mathscr{H}$, $\|\varphi\| = 1$

---

* Эта оценка получается на основе метода стационарной фазы для асимптотического вычисления интеграла $\varphi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} \varphi(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{kx} - k^2 t)} d\mathbf{k}$.

Метод стационарной фазы можно применять, если $\varphi(\mathbf{k})$ удовлетворяет определенным условиям гладкости. Но множество гладких функций $\mathscr{D}$ плотно в $\mathscr{H}$, а операторы $U(t)$ и $U_{\pm}$ ограничены, поэтому достаточно доказать существование сильных пределов $U(t)$ на множестве $\mathscr{D}$.

пределы

$$\lim_{t\to\pm\infty}\|e^{-iHt}\chi_n - e^{-iH_0t}\varphi\| = \lim_{t\to\pm\infty}\|e^{-iE_nt}\chi_n - e^{-iH_0t}\varphi\| =$$

$$= \lim_{t\to\pm\infty}\sqrt{\|\chi_n\|^2 + \|\varphi\|^2 - 2\operatorname{Re} e^{-iE_nt}(\chi_n, e^{-iH_0t}\varphi)} = \sqrt{2}.$$

Мы учли, что

$$\lim_{t\to\pm\infty}(\chi_n, e^{-iH_0t}\varphi) = 0, \tag{6}$$

так как вектор $e^{-iH_0t}\varphi$ слабо стремится к нулю при $t\to\pm\infty$.

Из физических соображений также легко понять, почему состояние $e^{-iHt}\chi_n$ не стремится асимптотически к некоторому состоянию свободного движения при $e^{-iH_0t}\varphi$. Вектор $e^{-iHt}\chi_n$ описывает состояние частицы, локализованной около рассеивающего центра, а вектор $e^{-iH_0t}\varphi$ при любом $\varphi\in\mathscr{H}$ — состояние частицы, уходящей при $t\to\pm\infty$ на бесконечность.

Ясно, что (1) несправедливо и для любого вектора $\chi\in\mathscr{B}$, где $\mathscr{B}$ — подпространство, натянутое на собственные векторы χ_n оператора H. Будем называть подпространство $\mathscr{B}$ подпространством связанных состояний.

Итак, мы видим, что по произвольному вектору ψ, вообще говоря, нельзя построить вектор φ_+, удовлетворяющий (1) при $t\to+\infty$. Для того чтобы выяснить, возможно ли по построенному вектору $\psi = U_-\varphi_-$ найти φ_+, нам потребуется изучить свойства волновых операторов.

Обозначим через $\mathscr{R}_\pm$ области значений операторов $U_\pm$. Покажем, что $\mathscr{R}_\pm\perp\mathscr{B}$.

Достаточно проверить, что векторы $U_\pm\varphi$ ортогональны к собственным векторам χ_n для любого $\varphi\in\mathscr{H}$. Из (6) получим

$$(U_\pm\varphi, \chi_n) = \lim_{t\to\pm\infty}(e^{iHt}e^{-iH_0t}\varphi, \chi_n) =$$

$$= \lim_{t\to\pm\infty} e^{iE_nt}(e^{-iH_0t}\varphi, \chi_n) = 0.$$

Следующее свойство мы приведем без доказательства. Оказывается, что

$$\mathscr{R}_+ = \mathscr{R}_- = \mathscr{R}, \quad \mathscr{R}\oplus\mathscr{B} = \mathscr{H}. \tag{7}$$

Доказательство этого утверждения является наиболее сложным в абстрактной теории рассеяния. Подпространство $\mathscr{R}$, совпадающее с областями значений операторов $U_\pm$, часто называют подпространством состояний рассеяния.

Покажем далее, что операторы $U_\pm$ являются изометрическими. Действительно, из сильной сходимости оператора $U(t)$ при $t\to\pm\infty$ и унитарности этого оператора следует, что

$$(U_\pm\varphi, U_\pm\varphi) = \lim_{t\to\pm\infty}(U(t)\varphi, U(t)\varphi) = (\varphi, \varphi),$$

т. е. операторы $U_\pm$ сохраняют норму вектора φ, и поэтому

$$U^*_\pm U_\pm = I. \tag{8}$$

Операторы $U_\pm$ являются унитарными только при отсутствии собственных векторов дискретного спектра у оператора H. В этом случае операторы $U_\pm$ отображают $\mathscr{H}$ на $\mathscr{H}$ взаимно однозначно, и тогда наряду с (8) имеет место равенство

$$U_\pm U^*_\pm = I. \tag{9}$$

Если H имеет дискретный спектр и $\psi \in \mathscr{R}$, тогда найдутся такие векторы φ_+ и φ_-, что

$$\psi = U_\pm \varphi_\pm.$$

Домножая это равенство на $U^*_\pm$ и учитывая (8), получим

$$U^*_\pm \psi = \varphi_\pm, \tag{10}$$

$$U_\pm U^*_\pm \psi = \psi, \quad \psi \in \mathscr{R}. \tag{11}$$

С другой стороны, для $\chi \in \mathscr{B}$ и любого $\varphi \in \mathscr{H}$

$$(U^*_\pm \chi, \varphi) = (\chi, U_\pm \varphi) = 0,$$

поэтому

$$U^*_\pm \chi = 0, \quad U_\pm U^*_\pm \chi = 0, \quad \chi \in \mathscr{B}.$$

Любой вектор $\varphi \in \mathscr{H}$ можно представить в виде

$$\varphi = \chi + \psi, \quad \chi \in \mathscr{B}, \quad \psi \in \mathscr{R}$$

и

$$U_\pm U^*_\pm \varphi = \psi = (I - P)\varphi,$$

где P — проектор на подпространстве связанных состояний $\mathscr{B}$. Таким образом, в общем случае вместо (9) имеет место равенство

$$U_\pm U^*_\pm = I - P, \tag{12}$$

поэтому при наличии дискретного спектра операторы $U_\pm$ не являются унитарными.

Наконец, покажем, что для любой ограниченной функции $f(s)$, $s \in \mathbf{R}$ справедливо равенство

$$f(H)\,U_\pm = U_\pm f(H_0). \tag{13}$$

Переходя к пределу при $t \to \pm\infty$ в равенстве

$$e^{iH\tau} e^{iHt} e^{-iH_0 t} \varphi = e^{iH(t+\tau)} e^{-iH_0(t+\tau)} e^{iH_0\tau} \varphi, \quad \varphi \in \mathscr{H}, \quad \tau \in \mathbf{R},$$

получим

$$e^{iH\tau} U_\pm = U_\pm e^{iH_0\tau},$$

откуда сразу следует (13).

Вернемся к нестационарной задаче о рассеянии, постановка которой была сформулирована в начале параграфа. Если для некоторого потенциала V существуют волновые операторы $U_\pm$ и справедливо (7), то нестационарная задача о рассеянии имеет единственное решение.

Вектор ψ находится для произвольного $\varphi_- \in \mathscr{H}$ по формуле

$$\psi = U_- \varphi_-.$$

Вектор $\psi \in \mathscr{R}$, поэтому согласно (10)

$$\varphi_+ = U_+^* \psi$$

или

$$\varphi_+ = U_+^* U_- \varphi_-,$$

что можно переписать в виде

$$\varphi_+ = S\varphi_-, \tag{14}$$

где

$$S = U_+^* U_-.$$

Унитарность оператора рассеяния S следует из (8), (12) и очевидных равенств $PU_\pm = 0$. Действительно,

$$S^*S = U_-^* U_+ U_+^* U_- = U_-^* (I - P) U_- = I$$

и аналогично

$$SS^* = I.$$

Далее из (13) следует, что

$$Sf(H_0) = f(H_0) S. \tag{15}$$

Запишем (15) в импульсном представлении при $f(s) = s$

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') k'^2 = k^2 S(\mathbf{k}, \mathbf{k}').$$

Мы видим, что ядро оператора S может быть записано в виде

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2S(k, \omega, \omega')}{k} \delta\left(k^2 - k'^2\right), \quad \mathbf{k} = k\omega, \tag{16}$$

и соотношение (14) принимает вид

$$\varphi_+(k, \omega) = \int_{S_2} d\omega' \int_0^\infty k'^2 \, dk' \, \frac{2S(k, \omega, \omega')}{k} \frac{\delta(k - k')}{2k} \varphi_-(k', \omega') =$$

$$= \int_{S_2} S(k, \omega, \omega') \varphi_-(k, \omega') \, d\omega'.$$

Сравнивая эту формулу с (40.9), получаем, что функция $S(k, \omega, \omega')$, введенная соотношением (16), совпадает с функцией $S(k, \omega, \omega')$ из § 39. Эта связь между S-оператором нестационарной теории рассеяния и асимптотикой волновых функций

стационарной задачи о рассеянии может быть установлена, конечно, и в рамках строгой теории.

Существует простая связь между волновыми операторами $U_{\pm}$ и введенными в § 39 решениями уравнения Шредингера $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$. Напомним, что решение нестационарного уравнения Шредингера $\psi(\mathbf{x}, t)$, построенное по функции $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$, имеет вид

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} \varphi_-(\mathbf{k})\, \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})\, e^{-ik^2 t}\, d\mathbf{k}.$$

Здесь мы обозначили функцию $C(\mathbf{k})$ через $\varphi_-(\mathbf{k})$. Мы знаем, что функция $\psi(\mathbf{x}, t)$ при $t \to -\infty$ асимптотически стремится к

$$\varphi_-(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} \varphi_-(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} e^{-ik^2 t}\, d\mathbf{k}.$$

Полагая в этих равенствах $t = 0$, получим

$$\psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k})\, \varphi_-(\mathbf{k})\, d\mathbf{k}, \quad \varphi_-(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{\mathbf{R}^3} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \varphi_-(\mathbf{k})\, d\mathbf{k}.$$

Сравнивая эти формулы с $\psi = U_-\varphi_-$, записанной в импульсном представлении

$$\psi(\mathbf{k}) = \int_{\mathbf{R}^3} U_-(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\, \varphi_-(\mathbf{k}')\, d\mathbf{k}',$$

получаем, что

$$U_-(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{k}')\, d\mathbf{x}.$$

Можно показать также, что

$$U_+(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{R}^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \overline{\psi(\mathbf{x}, -\mathbf{k}')}\, d\mathbf{x}.$$

Связь операторов $U_{\pm}$ с собственными функциями непрерывного спектра оператора H становится особенно наглядной, если выписать (13) при $f(s) = s$, (8) и (12) в импульсном представлении

$$HU_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) = k^2 U_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k}) \tag{17}$$

(H — оператор Шредингера в импульсном представлении),

$$\int_{\mathbf{R}^3} U_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k}_1)\, \overline{U_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k}_2)}\, d\mathbf{p} = \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \tag{18}$$

$$\int_{\mathbf{R}^3} U_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k})\, \overline{U_{\pm}(\mathbf{p}', \mathbf{k})}\, d\mathbf{k} + \sum_n \chi_n(\mathbf{p})\, \overline{\chi_n(\mathbf{p}')} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \tag{19}$$

Формула (17) показывает, что ядра операторов $U_{\pm}$, рассматриваемые как функции от $\mathbf{p}$, есть собственные функции непрерывного спектра, соответствующие собственному значению k^2. Тогда (18) — условие «ортонормированности» собственных функций $U_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k})$, а (19) — условие полноты систем $\{\chi_n(\mathbf{p}), U_{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{k})\}$.

§ 44. Свойства коммутирующих операторов

В этом параграфе мы рассмотрим свойства коммутирующих операторов, еще раз обсудим вопрос об одновременной измеримости наблюдаемых и введем важное для квантовой механики понятие полного набора коммутирующих наблюдаемых.

Для начала рассмотрим два самосопряженных коммутирующих оператора A и B с чисто точечным спектром. Покажем, что такие операторы имеют общий полный набор собственных векторов. Пусть

$$\begin{aligned} A\varphi_m^{(i)} &= \lambda_m \varphi_m^{(i)}, \quad i = 1,\ 2,\ \ldots, \\ B\psi_n^{(j)} &= \mu_n \psi_n^{(j)}, \quad j = 1,\ 2,\ \ldots, \end{aligned} \tag{1}$$

По условию наборы векторов $\{\varphi_m^{(i)}\}$ и $\{\psi_n^{(j)}\}$ являются полными в пространстве состояний $\mathcal{H}$.

Обозначим через $\mathcal{H}_m$ собственное подпространство оператора A, соответствующее собственному значению λ_m, через P_m проектор на это подпространство. Аналогично введем $\mathcal{H}'_n$ и P'_n для оператора B. Из условия $AB = BA$ следует, что $P_m P'_n = P'_n P_m$. Введем оператор $P_{mn} = P_m P'_n$. Очевидно, что P_{mn} — оператор проектирования на подпространство $\mathcal{H}_{mn} = \mathcal{H}_m \cap \mathcal{H}'_n$. Если $\varphi \in \mathcal{H}_{mn}$, то он удовлетворяет обоим уравнениям (1). Далее, $\mathcal{H}_{mn} \perp \mathcal{H}_{m'n'}$, если индекс mn отличен от индекса $m'n'$. Пусть $\{\varphi_{mn}^{(k)}\}$, $k = 1,\ 2,\ \ldots$ — базис в подпространстве $\mathcal{H}_{mn}$. Для того чтобы доказать полноту системы векторов $\{\varphi_{mn}^{(k)}\}$ $k, m, n = 1, 2, \ldots$ в $\mathcal{H}$, достаточно проверить, что не существует вектора $\varphi \in \mathcal{H}$, $\varphi \neq 0$, ортогонального ко всем $\mathcal{H}_{mn}$. Из полноты набора собственных векторов оператора A следует, что для любого $\varphi \neq 0$ найдется номер m, для которого $P_m\varphi \neq 0$. Аналогично найдется номер n такой, что $P'_n P_m \varphi \neq 0$, т. е. $P_{mn}\varphi \neq 0$ для любого $\varphi \neq 0$ и некоторых m и n.

Таким образом, мы показали, что $\{\varphi_{mn}^{(k)}\}$ является базисом в $\mathcal{H}$, состоящим из общих собственных векторов операторов A и B.

Справедливо и обратное утверждение. Если два оператора имеют общий полный набор собственных векторов, то они коммутируют. Действительно, пусть $\{\varphi_{mn}^{(k)}\}$ — общий полный набор

собственных векторов операторов A и B

$$A\psi^{(k)}_{mn} = \lambda_m \varphi^{(n)}_{mn},$$
$$B\varphi^{(k)}_{mn} = \mu_n \varphi^{(k)}_{mn}, \quad k = 1,\ 2,\ \ldots \tag{2}$$

Тогда $AB\varphi^{(k)}_{mn} = \lambda_m \mu_n \varphi^{(k)}_{mn}$ и $BA\varphi^{(k)}_{mn} = \lambda_m \mu_n \varphi^{(k)}_{mn}$. Из полноты набора следует, что $AB\varphi = BA\varphi$ для любого $\varphi \in \mathscr{H}$.

Доказанные утверждения справедливы для произвольного числа попарно коммутирующих самосопряженных операторов $A_1, \ldots, A_n, \ldots$ с чисто точечным спектром и с некоторыми оговорками для операторов с непрерывным спектром.

Имеет место также следующее утверждение. Если самосопряженные операторы $A_1, \ldots, A_n$ попарно коммутируют, то существует такой самосопряженный оператор R, что все операторы A_i, $i = 1, 2, \ldots, n$ являются его функциями $A_i = F_i(R)$.

Для операторов с чисто точечным спектром построить такой оператор R очень легко. Рассмотрим случай двух коммутирующих операторов A и B. Они имеют общую полную систему собственных векторов $\{\varphi^{(k)}_{mn}\}$, которые удовлетворяют уравнениям (2). Определим оператор R соотношениями

$$R\varphi^{(k)}_{mn} = r^{(k)}_{mn} \varphi^{(k)}_{mn},$$

где $r^{(k)}_{mn}$ — вещественные различные числа. Очевидно, что R — самосопряженный оператор с простым чисто точечным спектром. Введем теперь вещественные функции $F(x)$ и $G(x)$, удовлетворяющие условиям $\lambda_m = F\left(r^{(k)}_{mn}\right)$, $\mu_n = G\left(r^{(k)}_{mn}\right)$. Для значений x, не совпадающих с числами $r^{(k)}_{mn}$ вид функций $F(x)$ и $G(x)$ несуществен. Из определения функции от оператора сразу следует, что $A = F(R)$ и $B = G(R)$. Общая теорема для коммутирующих операторов $A_1, \ldots, A_n$ с произвольным спектром была доказана фон Нейманом.

Обсудим физические следствия сформулированных утверждений для коммутирующих операторов. Напомним, что соотношение неопределенностей Гейзенберга не накладывает никаких ограничений на дисперсии коммутирующих наблюдаемых и в этом смысле мы назвали их одновременно измеримыми. Мы теперь можем уточнить понятие одновременной измеримости. Последнее утверждение показывает, что для измерения численных значений коммутирующих наблюдаемых достаточно измерить одну наблюдаемую R, т. е. принципиально возможно при единичном измерении узнать численные значения всех наблюдаемых $A_1, \ldots, A_n$. Из существования системы общих собственных векторов следует существование бесконечного множества состояний, в которых все эти наблюдаемые имеют определенные численные значения. Наконец, из результатов следующего параграфа будет следовать, что можно построить общую функцию

распределения численных значений одновременно измеримых наблюдаемых для любого состояния.

Введем понятие функции от коммутирующих операторов A и B. По вещественной функции $f(x, y)$ можно построить самосопряженный оператор $f(A, B)$, положив

$$f(A,\ B)\,\varphi_{mn}^{(k)} = f\left(\lambda_m,\ \mu_n\right)\varphi_{mn}^{(k)},$$

где векторы $\varphi_{mn}^{(k)}$ удовлетворяют (2). Это определение согласуется с введенным ранее определением функции от одновременно измеримых наблюдаемых.

Справедливым является следующее утверждение. Если оператор D коммутирует с любым оператором C, коммутирующим со всеми операторами $A_1, \ldots, A_n$, $[A_i, A_k] = 0$, то оператор D является функцией от этих операторов. При доказательстве опять ограничимся случаем двух операторов с чисто точечным спектром.

Пусть каждой паре собственных значений λ_m и μ_n соответствует один собственный вектор

$$A\varphi_{mn} = \lambda_m\varphi_{mn}, \quad B\varphi_{mn} = \mu_n\varphi_{mn}.$$

В этом случае достаточно коммутативности оператора D с самими операторами A и B. Действительно, если $[D, A] = 0$ и $\varphi \in \mathscr{H}_m$, то и $D\varphi \in \mathscr{H}_m$, так как $AD\varphi = DA\varphi = \lambda_m D\varphi$. Аналогично из условия $[D, B] = 0$ получаем, что вместе с $\varphi \in \mathscr{H}'_n$ и $D\varphi \in \mathscr{H}'_n$. Поэтому, если $\varphi \in \mathscr{H}_{mn}$, то $D\varphi \in \mathscr{H}_{mn}$. По условию пространства $\mathscr{H}_{mn}$ одномерны и $D\varphi_{mn}$ лишь численным множителем может отличаться от φ_{mn}, т. е. $D\varphi_{mn} = \varkappa_{mn}\varphi_{mn}$. Выбирая функцию $f(x, y)$ такую, что $\varkappa_{mn} = f(\lambda_m, \lambda_n)$, видим: $D = f(A, B)$.

Перейдем к более сложному случаю, когда подпространства $\mathscr{H}_{mn}$ не являются одномерными

$$A\varphi_{mn}^{(k)} = \lambda_m\varphi_{mn}^{(k)}, \quad B\varphi_{mn}^{(k)} = \mu_n\varphi_{mn}^{(k)}, \qquad k = 1,\ 2,\ \ldots$$

Рассмотрим совокупность собственных векторов, соответствующих паре λ_m, μ_n. Индекс mn для сокращения записи опустим. Введем операторы $C^{(j)}$ и $C^{(jl)}$, определив их равенствами

$$C^{(j)}\varphi^{(k)} = \delta_{jk}\varphi^{(k)},$$

$$C^{(jl)}\varphi^{(k)} = \begin{cases} \varphi^{(j)}, & k = l, \\ \varphi^{(l)}, & k = j, \\ 0, & k \neq j, \quad k \neq l, \end{cases}$$

$$C^{(j)}\varphi = C^{(jl)}\varphi = 0, \quad \varphi \in \mathscr{H}_{mn}^{\perp},$$

где $\mathscr{H}_{mn}^{\perp}$ — ортогональное дополнение к подпространству $\mathscr{H}_{mn}$. Легко проверить, что все операторы $C^{(j)}$ и $C^{(jl)}$ коммутируют

с A и B. Из условия $[D, C^{(jl)}] = 0$ получим

$$D\varphi^{(j)} = DC^{(jl)}\varphi^{(l)} = C^{(jl)}D\varphi^{(l)},$$

откуда следует, что $D\varphi^{(j)}$ пропорционален $\varphi^{(j)}$:

$$D\varphi^{(j)} = \varkappa^{(j)}\varphi^{(j)}.$$

Покажем, что все числа $\varkappa^{(j)}$ совпадают

$$\varkappa^{(j)}\varphi^{(j)} = D\varphi^{(j)} = DC^{(jl)}\varphi^{(l)} = C^{(jl)}D\varphi^{(l)} = C^{(jl)}\varkappa^{(l)}\varphi^{(l)} = \varkappa^{(l)}\varphi^{(j)}.$$

Таким образом, векторы $\varphi_{mn}^{(k)}$ являются собственными векторами оператора D, причем собственные значения от индекса k не зависят $D\varphi_{mn}^{(k)} = \varkappa_{mn}\varphi_{mn}^{(k)}$. Поэтому, как и в первом случае, $D = f(A, B)$.

Обратим внимание на то, что коммутативности оператора D с самими операторами A и B здесь было бы недостаточно. Более того, если из условия коммутативности оператора D с A и B следует $D = f(A, B)$, то можно утверждать, что каждой паре собственных значений λ_m и μ_n соответствует один собственный вектор φ_{mn}. Действительно, если таких векторов несколько, то всегда может быть построен оператор, коммутирующий с A и B и не являющийся их функцией. В качестве такого оператора можно взять, например, оператор $C^{(jl)}$.

Теперь мы можем ввести важное понятие о полной системе коммутирующих операторов. Система самосопряженных операторов $A_1, \ldots, A_n$ называется полной системой коммутирующих операторов, если

1) операторы A_i попарно коммутируют $[A_i, A_j] = 0$, $i, j = 1, 2, \ldots, n$,

2) ни один из операторов A_i не является функцией от остальных,

3) любой оператор, коммутирующий со всеми A_i, есть функция от этих операторов.

Из доказанных выше утверждений и условий 1) и 3) определения полного набора $A_1, \ldots, A_n$ следует, что существует общая полная система собственных векторов всех этих операторов

$$A_i\varphi_{a_1, \ldots, a_n} = a_i\varphi_{a_1, \ldots, a_n}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n,$$

причем каждой совокупности собственных значений $a_1, \ldots, a_n$ соответствует один собственный вектор $\varphi_{a_1, \ldots, a_n}$. Из условия 2) следует, что последним свойством не обладает общая полная система векторов для части операторов $A_1, \ldots, A_n$. Фактически условие 2) обозначает, что среди операторов $A_1, \ldots, A_n$ нет «лишних».

Если в результате измерений известно, что численные значения полного набора наблюдаемых $A_1, \ldots, A_n$ в некотором

состоянии с достоверностью равны $a_1, \ldots, a_n$, то можно утверждать, что это состояние описывается вектором $\varphi_{a_1, \ldots, a_n}$.

В заключение заметим, что если набор попарно коммутирующих независимых операторов не является полным, то его можно и притом многими способами дополнить до полного набора.

§ 45. Представление пространства состояний по полному набору наблюдаемых

Пусть дан полный набор операторов $A_1, \ldots, A_n$ с чисто точечным спектром. Эти операторы имеют общий полный набор собственных векторов $\varphi_{a_1, \ldots, a_n}$, и каждому набору собственных чисел соответствует один вектор $\varphi_{a_1, \ldots, a_n}$. Произвольный вектор $\psi \in \mathscr{H}$ может быть представлен в виде ряда

$$\psi = \sum_{a_1, \ldots, a_n} \psi(a_1, \ldots, a_n) \varphi_{a_1, \ldots, a_n}, \quad \psi(a_1, \ldots, a_n) = (\psi, \varphi_{a_1, \ldots, a_n}).$$

Эта формула определяет взаимно-однозначное соответствие между векторами ψ и функциями $\psi(a_1, \ldots, a_n)$, определенными на спектре операторов $A_1, \ldots, A_n$,

$$\psi \leftrightarrow \psi(a_1, \ldots, a_n).$$

Очевидно, что

$$(\psi_1, \psi_2) = \sum_{a_1, \ldots, a_n} \psi_1(a_1, \ldots, a_n) \overline{\psi_2(a_1, \ldots, a_n)},$$

$$A_i\psi \leftrightarrow a_i\psi(a_1, \ldots, a_n),$$

т. е. построенное представление является собственным для всех операторов $A_1, \ldots, A_n$ (действие этих операторов сводится к умножению на переменную).

Функция $\psi(a_1, \ldots, a_n)$ называется волновой функцией. Чтобы выяснить ее физический смысл, построим, как в предыдущем параграфе, оператор R такой, что $A_i = F_i(R)$, $i = 1, 2, \ldots, n$,

$$R\varphi_{a_1, \ldots, a_n} = r_{a_1, \ldots, a_n} \varphi_{a_1, \ldots, a_n},$$

где $r_{a_1, \ldots, a_n}$ — различные вещественные числа и $a_i = F_i(r_{a_1, \ldots, a_n})$. Мы знаем, что $|(\psi, \varphi_{a_1, \ldots, a_n})|^2 = |\psi(a_1, \ldots, a_n)|^2$ есть вероятность в результате измерения получить численное значение наблюдаемой R, равное $r_{a_1, \ldots, a_n}$. Поэтому $|\psi(a_1, \ldots, a_n)|^2$ является вероятностью получить в результате одновременного измерения наблюдаемых $A_1, \ldots, A_n$ значения $a_1, \ldots, a_n$.

Все эти результаты обобщаются на случай полного набора операторов $A_1, \ldots, A_n$ с произвольным спектром. Сформулируем без доказательства теорему.

Теорема. Пусть дан полный набор коммутирующих операторов $A_1, \ldots, A_n$. Тогда существует такое представление пространства состояний, что вектор $\psi \in \mathscr{H}$ представляется функцией $\psi(a_1, \ldots, a_n)$, определенной на некотором множестве $\mathfrak{A}$ ($a = (a_1, \ldots, a_n) \in \mathfrak{A}$). На множестве $\mathfrak{A}$ задана мера $d\mu(a)$ и скалярное произведение определяется формулой

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{\mathfrak{A}} \psi_1(a) \overline{\psi_2(a)} \, d\mu(a).$$

Операторы $A_1, \ldots, A_n$ в этом представлении являются операторами умножения на переменную

$$A_i \psi(a_1, \ldots, a_n) = a_i \psi(a_1, \ldots, a_n), \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Функция $|\psi(a_1, \ldots, a_n)|^2$ есть плотность общей функции распределения для наблюдаемых $A_1, \ldots, A_n$ относительно меры $d\mu(a)$.

Выше мы уже имели примеры полных наборов коммутирующих операторов и соответствующих представлений пространства состояний $\mathscr{H}$.

Для бесструктурной частицы полный набор образуют операторы координат Q_1, Q_2, Q_3. Этому набору соответствует координатное представление. Аналогично строится импульсное представление по полному набору P_1, P_2, P_3. Полный набор образуют также операторы H, L^2, L_3, где H — оператор Шредингера для частицы в центральном поле. Представление, соответствующее этому полному набору, описано в § 31. Для одномерной частицы оператор Шредингера H для гармонического осциллятора сам по себе представляет полный набор. Соответствующее представление было построено в § 18.

§ 46. Спин

До сих пор мы считали, что электрон представляет собой материальную точку с массой m и зарядом $-e$, т. е. является бесструктурной частицей, пространство состояний которой $\mathscr{H}$ может быть реализовано, например, как пространство $L^2(\mathbf{R}^3)$ квадратично интегрируемых функций $\psi(\mathbf{x})$. На основе такого представления об электроне мы рассчитали энергетические уровни атома водорода и получили результаты, которые с большой степенью точности совпадают с экспериментальными. Тем не менее существуют эксперименты, которые показывают, что подобное описание электрона не является полным.

Мы уже упоминали об опытах Штерна и Герлаха. Эти опыты показали, что проекция на некоторое направление магнитного момента атома водорода в основном состоянии может принимать два значения. В § 34 мы построили квантовую наблюдаемую «проекция магнитного момента» заряженной

бесструктурной частицы и видели, что третья проекция магнитного момента пропорциональна проекции момента импульса L_3. Из расчета атома водорода мы знаем, что численное значение L_3 для основного состояния есть нуль. Поэтому и магнитный момент атома в основном состоянии должен равняться нулю. Это противоречие может быть объяснено, если предположить, что сам электрон имеет магнитный и механический моменты, проекции которых на некоторое направление могут принимать два значения.

Собственный момент импульса электрона называют спином в отличие от момента, связанного с его движением в пространстве, который обычно называют орбитальным моментом.

Существование наблюдаемой, численные значения которой могут принимать два значения, приводит к необходимости считать, что электрон может находиться в двух различных внутренних состояниях, независимо от состояния его движения в пространстве. Это в свою очередь приводит к удвоению общего числа состояний электрона. Так, каждому состоянию электрона в атоме водорода (без учета спина) соответствует два состояния, различающихся проекцией спина на некоторое направление.

Если предположить, что не существует какого-либо дополнительного взаимодействия, связанного со спином, то кратность всех собственных значений энергии оказывается в два раза больше, чем для бесспиновой частицы. Если же такие взаимодействия существуют, то вырождения, связанные со спином, могут сниматься и произойдет расщепление энергетических уровней. Опыты показывают, что такое расщепление действительно имеет место.

В § 32 мы описали модель атомов щелочных металлов, основанную на предположении, что валентный электрон атома движется в центральном поле. Эта модель неплохо описывает расположение энергетических уровней атомов щелочных металлов, однако ни сама модель, ни какое-либо ее усовершенствование не могут объяснить наблюдаемое расщепление уровней при $l \neq 0$ на два близких. Гипотеза о спине позволяет легко объяснить это расщепление. В атомной физике существует еще множество явлений, которые находят свое объяснение на основе этой гипотезы. Мы увидим позже, что только удвоение числа состояний электрона, связанное со спином, позволяет объяснить длину периодов в таблице Менделеева.

Хотелось бы подчеркнуть, что гипотеза о спине электрона является гипотезой о природе конкретной элементарной частицы и не затрагивает общих принципов квантовой механики. Аппарат квантовой механики оказывается приспособленным для описания частицы со спином.

Мы начнем с построения пространства состояний для электрона. Без учета спина пространством состояний $\mathscr{H}$ в координ-

натном представлении является пространство $L^2(\mathbf{R}^3)$. Введение спина требует расширения пространства состояний, так как число состояний частицы со спином больше, чем у бесспиновой частицы.

Удвоения числа состояний без изменения физического содержания теории легко добиться, заменив пространство состояний $\mathscr{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$ на $\mathscr{H}_S = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes C^2$ и сопоставив каждой наблюдаемой A в $\mathscr{H}$ наблюдаемую $A \otimes I$ в $\mathscr{H}_S$.

Поясним это подробнее. Элементами пространства состояний частицы со спином являются пары функций

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Скалярное произведение в пространстве $\mathscr{H}_S$ задается формулой

$$(\Psi, \Phi) = \int_{\mathbf{R}^3} \psi_1(\mathbf{x}) \overline{\varphi_1(\mathbf{x})}\, d\mathbf{x} + \int_{\mathbf{R}^3} \psi_2(\mathbf{x}) \overline{\varphi_2(\mathbf{x})}\, d\mathbf{x}. \tag{2}$$

Будем использовать для наблюдаемых $A \otimes I$ в $\mathscr{H}_S$ те же обозначения и названия, что и для наблюдаемых A в $\mathscr{H}$. Так возникают операторы координат Q_1, Q_2, Q_3, операторы проекций импульса P_1, P_2, P_3 и т. д., действующие в $\mathscr{H}_S$. Например,

$$P_1\Psi = P_1 \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}) \\ \psi_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{h}{i} \dfrac{\partial \psi_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{h}{i} \dfrac{\partial \psi_2(\mathbf{x})}{\partial x_1} \end{pmatrix}.$$

Каждому чистому состоянию $\psi(\mathbf{x})$ в $\mathscr{H}$ теперь соответствует два ортогональных состояния в $\mathscr{H}_S$

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{x}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$$

или любая их линейная комбинация. Ясно, что среднее значение любой наблюдаемой A в состоянии ψ будет равняться среднему значению наблюдаемой $A \otimes I$ в состояниях Ψ_1 и Ψ_2. Таким образом, введя пространство $\mathscr{H}_S$ и ограничиваясь рассмотрением наблюдаемых вида $A \otimes I$, мы действительно добились удвоения числа состояний, сохранив все физические следствия теории.

В пространстве $\mathscr{H}_S$, однако, наряду с наблюдаемыми $A \otimes I$ существуют и другие наблюдаемые, например, вида $I \otimes S$, где S — самосопряженный оператор в $\mathbf{C}^2$. Разумеется, в $\mathscr{H}_S$ существуют наблюдаемые, не представимые в виде $A \otimes I$ или $I \otimes S$, например, суммы или произведения таких наблюдаемых.

Рассмотрим наблюдаемые типа $I \otimes S$. Прежде всего очевидно, что любая такая наблюдаемая коммутирует с любой наблюдаемой $A \otimes I$ и не является функцией от наблюдаемых такого типа. Поэтому в пространстве $\mathscr{H}_S$ наблюдаемые Q_1, Q_2,

Q_3 не образуют полного набора коммутирующих наблюдаемых и мы должны будем дополнить этот набор до полного.

Любой самосопряженный оператор S в пространстве $\mathbf{C}^2$ представим самосопряженной матрицей второго порядка и может быть выражен в виде линейной комбинации четырех независимых матриц. В качестве таких матриц удобно выбрать единичную матрицу I и матрицы Паули σ_1, σ_2, σ_3:

$$I=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad \sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

Свойства матриц Паули обсуждались в § 27. Матрицы $S_j = \sigma_j/2$, $j = 1, 2, 3$ имеют перестановочные соотношения, такие же, как и для орбитального момента импульса

$$[S_1, S_2]=iS_3,\quad [S_2, S_3]=iS_1,\quad [S_3, S_1]=iS_2.$$

Мы видели, что перестановочные соотношения являются одним из наиболее важных свойств операторов момента импульса. Поэтому разумно отождествить операторы $I\otimes S_j$, $j=1,2,3$ с операторами проекций спина *. В дальнейшем эти операторы будем обозначать обычно через S_j. Операторы S_j имеют собственные значения $\pm 1/2$, которые и являются допустимыми значениями проекций спина на некоторое направление **. Векторы $\Psi_1=\begin{pmatrix}\psi(\mathbf{x})\\ 0\end{pmatrix}$ и $\Psi_2=\begin{pmatrix}0\\ \psi(\mathbf{x})\end{pmatrix}$ являются собственными векторами оператора S_3 с собственными значениями $+1/2$ и $-1/2$. Поэтому эти векторы описывают состояния с определенным значением третьей проекции спина.

Для дальнейшего нам удобно изменить обозначения и вектор $\Psi\in\mathscr{H}_S$ записывать в виде функции $\Psi(\mathbf{x}, s_3)$, где $\mathbf{x}\in\mathbf{R}^3$, а s_3 принимает два значения $+1/2$ и $-1/2$. Такая запись эквивалентна (1), если положить

$$\Psi\left(\mathbf{x}, \frac{1}{2}\right)=\psi_1(\mathbf{x}),\quad \Psi\left(\mathbf{x}, -\frac{1}{2}\right)=\psi_2(\mathbf{x}).$$

Из равенства

$$S_3\begin{pmatrix}\psi_1(\mathbf{x})\\ \psi_2(\mathbf{x})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\psi_1(\mathbf{x})\\ -\frac{1}{2}\psi_2(\mathbf{x})\end{pmatrix}$$

---

* Более глубокие соображения основаны на том факте, что для системы со сферически симметричным оператором Шредингера операторы $L_j + S_j$ являются квантовыми интегралами движения. Этот вопрос мы обсудим позже.

** Все формулы мы записываем в системе единиц, в которой $h = 1$. В обычной системе единиц операторы проекций спина имеют вид $S_j = (h/2)\,\sigma_j$ и допустимые численные значения этих проекций равны $\pm h/2$. Заметим, что при переходе к классической механике $h\to 0$ и соответственно проекции спина стремятся к нулю. Поэтому спин является специфически квантовой наблюдаемой.

следует, что

$$S_3\Psi(\mathbf{x}, s_3) = s_3\Psi(\mathbf{x}, s_3),$$

т. е. оператор S_3, так же, как и операторы Q_1, Q_2, Q_3, является оператором умножения на переменную. Мы видим, что построенное представление пространства состояний частицы со спином является собственным для операторов Q_1, Q_2, Q_3 и S_3, а эти операторы образуют полный набор коммутирующих операторов в $\mathscr{H}_S$.

Теперь легко понять физический смысл функций $\Psi(\mathbf{x}, s_3)$. В соответствии с общим толкованием $|\Psi(\mathbf{x}, s_3)|^2$ есть плотность функции распределения координат при условии, что третья проекция спина имеет значение s_3, а $\int\limits_{\mathbf{R}^3} |\Psi(\mathbf{x}, s_3)|^2 dx$ есть вероятность в результате измерения спина получить значение, равное s_3.

Наряду с наблюдаемыми S_1, S_2, S_3 можно ввести оператор квадрата спина $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2$. Подставляя в это выражение $S_j = \frac{1}{2}\sigma_j$ и учитывая, что $\sigma_j^2 = I$, получим $S^2 = \frac{3}{4}I$. Мы видим, что любой вектор $\Psi \in \mathscr{H}_S$ является «собственным» для оператора S^2 с собственным значением 3/4. Это собственное значение можно записать в виде* $s(s+1)$, где $s = 1/2$. Поэтому говорят, что спин электрона равен 1/2.

Построим представление группы вращений в пространстве $\mathscr{H}_S$. Напомним, что в пространстве $\mathscr{H} = L^2(\mathbf{R}^3)$ действует представление вращений g операторами $W(g) = e^{-i(L_1a_1 + L_2a_2 + L_3a)}$, а в пространстве $\mathbf{C}^2$ — операторами $U(g) = e^{-i(S_1a_1 + S_2a_2 + S_3a_3)}$. Отображение $g \to W_S(g)$, где $W_S(g) = W(g) \otimes U(g)$ является представлением в пространстве $\mathscr{H}_S$. Представление W_S есть произведение представлений W и U.

Операторы в $\mathscr{H}_S$ называются сферически-симметричными, если они коммутируют со всеми операторами $W_S(g)$. Если оператор Шредингера H является сферически-симметричным, то операторы $W_S(g)$ и инфинитезимальные операторы

$$\left.\frac{\partial W_S}{\partial a_j}\right|_{\mathbf{a}=0} = -i(L_j \otimes I + I \otimes S_j), \qquad j = 1, 2, 3,$$

являются интегралами движения. Поэтому для системы со сферически-симметричным оператором Шредингера справедлив закон сохранения полного момента импульса, проекции которого $J_j = L_j + S_j$.

---

* В § 29 мы показали, что из перестановочных соотношений для момента импульса следует, что собственные значения оператора квадрата момента имеют вид $j(j+1)$, где j — целое или полуцелое число. Это число для оператора спина принято обозначать буквой s.

Заметим, что в общем случае сферически-симметричного оператора H нет законов сохранения орбитального и спинового моментов по отдельности. Однако, если сферически-симметричный оператор Шредингера в $\mathscr{H}_S$ коммутирует и со всеми операторами $W(g)\otimes I$, то он коммутирует со всеми операторами $I\otimes U(g)$, и имеют место законы сохранения для наблюдаемых L_j и S_j по отдельности. Примером такого оператора Шредингера является оператор $H\otimes I$, где H — оператор Шредингера для частицы в центральном поле.

§ 47. Спин системы двух электронов

Пространство $\mathbf{C}^2$, введенное в предыдущем параграфе, часто называют спиновым пространством для электрона. Для системы из двух электронов спиновым пространством является пространство $\mathbf{C}^4=\mathbf{C}^2\otimes\mathbf{C}^2$. В пространстве $\mathbf{C}^2$ выберем базис, состоящий из собственных векторов оператора S_3 $U_+=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ и $U_-=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ с собственными значениями 1/2 и —1/2 соответственно. В качестве базисных векторов в пространстве $\mathbf{C}^4$ можно взять векторы $U_+^{(1)}U_+^{(2)}$, $U_-^{(1)}U_-^{(2)}$, $U_+^{(1)}U_-^{(2)}$ и $U_-^{(1)}U_+^{(2)}$, где индексы (1) и (2) нумеруют спиновые подпространства электронов.

Более удобным, однако, оказывается другой ортонормированный базис, состоящий из векторов

$$W_1=U_+^{(1)}U_+^{(2)},$$

$$W_2=U_-^{(1)}U_-^{(2)},$$

$$W_3=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_+^{(1)}U_-^{(2)}+U_-^{(1)}U_+^{(2)}\right),$$

$$W_4=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_+^{(1)}U_-^{(2)}-U_-^{(1)}U_+^{(2)}\right).$$

Удобство нового базиса состоит в том, что векторы W_i, $i=1$, 2, 3, 4 являются собственными векторами операторов

$$S_3=S_3^{(1)}+S_3^{(2)}$$

и

$$S^2=S_1^2+S_2^2+S_3^2.$$

Здесь оператор S_3 есть третья проекция полного спина двух электронов *, аналогичный смысл имеют операторы S_1 и S_2. Оператор S^2 есть квадрат полного спина.

---

* В более точной записи $S_3=\frac{1}{2}\sigma_3\otimes I+\frac{1}{2}I\otimes\sigma_3$. Операторы $\sigma_j\otimes I$ и $I\otimes\sigma_j$ мы обозначаем в дальнейшем через $\sigma_j^{(1)}$ и $\sigma_j^{(2)}$ соответственно.

Для того чтобы проверить сформулированное утверждение относительно векторов W_i, $i = 1, 2, 3, 4$, найдем результат действия операторов σ_1, σ_2, σ_3 на базисные векторы U_+ и U_-. Имеем

$$\begin{gathered}\sigma_1 U_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = U_-, \\ \sigma_1 U_- = U_+, \\ \sigma_2 U_+ = iU_-, \\ \sigma_2 U_- = -iU_+, \\ \sigma_3 U_+ = U_+, \\ \sigma_3 U_- = -U_-. \end{gathered} \tag{1}$$

Используя эти формулы, получим

$$\begin{gathered} S_3 W_1 = \frac{1}{2}\left(\sigma_3^{(1)} + \sigma_3^{(2)}\right) U_+^{(1)} U_+^{(2)} = U_+^{(1)} U_+^{(2)} = 1 W_1, \\ S_3 W_2 = -1 W_2, \\ S_3 W_3 = 0 W_3, \\ S_3 W_4 = 0 W_4. \end{gathered} \tag{2}$$

Наряду с (2) имеют место формулы

$$\begin{gathered} S^2 W_j = 2 W_j, \quad j = 1, 2, 3, \\ S^2 W_4 = 0 W_4. \end{gathered} \tag{3}$$

Проверим формулу (3) для вектора W_3:

$$\begin{gathered} S^2 W_3 = \left(S_1^2 + S_2^2 + S_3^2\right) W_3 = \\ = \frac{1}{4}\left[\left(\sigma_1^{(1)} + \sigma_1^{(2)}\right)^2 + \left(\sigma_2^{(1)} + \sigma_2^{(2)}\right)^2 + \left(\sigma_3^{(1)} + \sigma_3^{(2)}\right)^2\right] W_3 = \\ = \left[\frac{3}{2} I + \frac{1}{2}\left(\sigma_1^{(1)}\sigma_1^{(2)} + \sigma_2^{(1)}\sigma_2^{(2)} + \sigma_3^{(1)}\sigma_3^{(2)}\right)\right] \frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_+^{(1)} U_-^{(2)} + U_-^{(1)} U_+^{(2)}\right) = \\ = \frac{3}{2} W_3 + \frac{1}{2} W_3 + \frac{1}{2} W_3 - \frac{1}{2} W_3 = 2 W_3. \end{gathered}$$

Здесь мы использовали (1) и равенства $\sigma_j^2 = I$, $j = 1, 2, 3$. Таким образом, первые три вектора W_1, W_2 и W_3 описывают состояния, в которых квадрат полного спина системы из двух электронов равен 2. Число 2 можно записать в виде $2 = S(S+1)$, где $S = 1$, поэтому полный спин в этих состояниях равен единице. Проекция полного спина в соответствии с общими свойствами момента импульса принимает в этих состояниях значения ± 1 и 0. Вектор W_4 описывает состояние с полным спином, равным нулю. Иногда говорят, что в состояниях W_1, W_2, W_3 спины электронов параллельны, а в состоянии W_4 — антипараллельны.

Обсудим полученный результат с точки зрения теории групп. Мы знаем, что в пространстве $\mathbf{C}^2$ действует неприводимое представление группы вращений операторами $U(g)=e^{-\frac{i}{2}(\sigma_1 a_1+\sigma_2 a_2+\sigma_3 a_3)}$. Ясно, что отображение $g\to\tilde{U}(g)=$ $=U(g)\otimes U(g)=e^{-i(S_1a_1+S_2a_2+S_3a_3)}$ есть представление группы вращений в пространстве $\mathbf{C}^4$. Представление $\tilde{U}$ является тензорным произведением двух одинаковых представлений U, и оно приводимо. Согласно результатам § 29 пространство $\mathbf{C}^4$ представимо в виде прямой суммы двух инвариантных относительно операторов $\tilde{U}(g)$ подпространств, в которых действуют неприводимые представления. Первое из этих подпространств натягивается на векторы W_1, W_2, W_3, а второе — на вектор W_4. Используя обозначения § 29, мы можем записать этот результат в виде

$$D_{\frac{1}{2}}\otimes D_{\frac{1}{2}}=D_0\oplus D_1.$$

Заметим, что мы доказали частный случай теоремы о разложении тензорного произведения неприводимых представлений группы вращений. Сформулируем эту теорему без доказательства.

Пусть в пространствах $\mathscr{E}_1$ и $\mathscr{E}_2$ действуют неприводимые представления группы вращений D_{j_1} и D_{j_2}. Тогда тензорное произведение представлений представимо в виде прямой суммы неприводимых представлений

$$D_{j_1}\otimes D_{j_2}=D_{|j_1-j_2|}\oplus D_{|j_1-j_2|+1}\oplus\ldots\oplus D_{j_1+j_2}.$$

Последняя формула называется разложением Клебша — Гордана. Само разложение получается переходом от базиса, составленного из векторов $e_{j_1m_1}e_{j_2m_2}$, $m_k=-j_k,\ -j_k+1,\ \ldots,\ j_k$, $k=1,2$, где $e_{j_km_k}$ — собственные векторы операторов $\left(J^{(k)}\right)^2$ и $J_3^{(k)}$ к базису из векторов $e_{j_1j_2JM}$, $J=|j_1-j_2|,\ |j_1-j_2|+1,\ \ldots,\ j_1+j_2$, $M=-J,\ -J+1,\ \ldots,\ J$. Векторы $e_{j_1j_2JM}$ являются собственными для четырех коммутирующих операторов $(J^{(1)})^2$, $(J^{(2)})^2$

$$J^2=\left(J_1^{(1)}+J_1^{(2)}\right)^2+\left(J_2^{(1)}+J_2^{(2)}\right)^2+\left(J_3^{(1)}+J_3^{(2)}\right)^2,\ J_3=J_3^{(1)}+J_3^{(2)}.$$

Векторы $e_{j_1j_2JM}$ представимы в виде

$$e_{j_1j_2JM}=\sum_{m_1,\,m_2}C_{j_1j_2JM;\,j_1j_2m_1m_2}e_{j_1m_1}e_{j_2m_2}. \qquad (4)$$

Индексы суммирования m_k пробегают значения $-j_k$, $-j_k+1,\ \ldots,\ j_k$, $k=1,\ 2$. Коэффициенты разложения C в (4) называются коэффициентами Клебша — Гордана. Заметим, что мы, переходя к базису W_1, W_2, W_3, W_4, нашли эти коэффициенты для случая $j_1=j_2=1/2$.

Из сформулированной теоремы следует также, что если в некотором состоянии момент импульса $J^{(1)}$ имеет значение j_1,

а момент $J^{(2)}$ — значение j_2, то полный момент J может принимать значения $|j_1 - j_2|$, $|j_1 - j_2| + 1$, ..., $j_1 + j_2$. Складывать таким образом можно как орбитальные или спиновые моменты для различных частиц, так и орбитальный и спиновой момент для одной частицы.

В заключение этого параграфа отметим важное для дальнейшего свойство базисных элементов W_i, $i = 1, 2, 3, 4$. Для этого запишем их, вводя спиновые переменные $s_3^{(1)}$ и $s_3^{(2)}$, каждая из которых может принимать два значения $\pm 1/2$

$$
\begin{aligned}
&W_1(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}) = U_+(s_3^{(1)})\, U_+(s_3^{(2)}),\\
&W_2(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}) = U_-(s_3^{(1)})\, U_-(s_3^{(2)}),\\
&W_3(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[U_+(s_3^{(1)})\, U_-(s_3^{(2)}) + U_-(s_3^{(1)})\, U_+(s_3^{(2)})\right],\\
&W_4(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[U_+(s_3^{(1)})\, U_-(s_3^{(2)}) - U_-(s_3^{(1)})\, U_+(s_3^{(2)})\right],
\end{aligned}
\tag{5}
$$

где $U_+\left(\frac{1}{2}\right) = 1$, $U_+\left(-\frac{1}{2}\right) = 0$, $U_-\left(\frac{1}{2}\right) = 0$, $U_-\left(-\frac{1}{2}\right) = 1$.

Из (5) следует, что функции W_1, W_2, W_3 являются симметричными функциями от спиновых переменных

$$W_i(s_3^{(2)}, s_3^{(1)}) = W_i(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}), \quad i = 1, 2, 3,$$

а W_4 — антисимметричная функция

$$W_4(s_3^{(2)}, s_3^{(1)}) = -W_4(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}).$$

§ 48. Системы многих частиц. Принцип тождественности

До настоящего параграфа мы изучали в основном поведение одной квантовой частицы. Пространством состояний частицы без спина является в координатном представлении пространство $L^2(\mathbf{R}^3)$, а для частицы со спином $1/2$ — $L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathbf{C}^2$. Естественным обобщением таких пространств на случай системы из n частиц представляются пространство

$$L^2(\mathbf{R}^{3n}) = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \ \ldots \ \otimes L^2(\mathbf{R}^3)$$

для частиц без спина и пространство

$$L^2(\mathbf{R}^{3n}) \otimes \mathbf{C}^{2n} = L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathbf{C}^2 \otimes \ \ldots \ \otimes L^2(\mathbf{R}^3) \otimes \mathbf{C}^2$$

для частиц со спином $1/2$.

Сравнение теории с экспериментом показывает, однако, что такое предположение о пространствах состояний систем из n частиц оказывается справедливым только в том случае, когда среди частиц системы нет одинаковых. При наличии одинаковых частиц в поведении квантовых систем обнаруживаются

особенности, объяснение которых становится возможным на основе так называемого принципа тождественности. Сразу заметим, что принцип тождественности является новым принципом квантовой механики. Он не может быть выведен из других, сформулированных ранее, основных положений квантовой механики и должен быть постулирован.

Будем обозначать одним символом $\mathscr{H}$ пространства $L^2(\mathbf{R}^{3n})$ и $L^2(\mathbf{R}^{3n})\otimes \mathbf{C}^{2n}$, а элементы этих пространств записывать в виде $\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n)$, где $\xi_i = \mathbf{x}^{(i)}$ — для бесспиновой частицы и $\xi_i = \left(\mathbf{x}^{(i)},\ s_3^{(i)}\right)$ — для частицы со спином, $s_3^{(i)}$ — спиновая переменная i-й частицы. Для частицы со спином 1/2 переменные $s_3^{(i)}$ принимают два значения $\pm 1/2$.

Скалярное произведение в пространствах $\mathscr{H}$ также можно записывать единообразно

$$(\Psi,\ \Phi) = \int \Psi(\xi_1,\ \ldots,\ \xi_n)\, \overline{\Phi(\xi_1,\ \ldots,\ \xi_n)}\, d\xi_1\ \ldots\ d\xi_n,$$

подразумевая, что для частиц со спином интегрирование по переменным ξ_i есть интегрирование по пространственным переменным $\mathbf{x}^{(i)}$ и суммирование по спиновым переменным $s_3^{(i)}$.

Прежде чем переходить к формулировке принципа тождественности, рассмотрим группу перестановок S_n, которая называется также симметрической группой. Элементами этой группы являются перестановки

$$\pi = \begin{pmatrix} 1,\ 2,\ \ldots,\ n \\ i_1,\ i_2,\ \ldots,\ i_n \end{pmatrix},$$

а единичный элемент есть тождественная перестановка

$$I = \begin{pmatrix} 1,\ 2,\ \ldots,\ n \\ 1,\ 2,\ \ldots,\ n \end{pmatrix}.$$

Произведением перестановок $\pi = \pi_2\pi_1$ называется перестановка, которая получается в результате последовательного выполнения перестановок π_1 и π_2.

Легко построить представление группы S_n в пространстве $\mathscr{H}$. Введем операторы P_π, положив

$$P_\pi \Psi(\xi_1,\ \ldots,\ \xi_n) = \Psi\left(\xi_{i_1},\ \ldots,\ \xi_{i_n}\right).$$

Очевидно, P_π являются унитарными операторами и отображение $\pi \to P_\pi$ есть представление симметрической группы в пространстве $\mathscr{H}$.

В пространстве $\mathscr{H}$ сразу выделяются два инвариантных относительно операторов P_π подпространства. Это подпространство $\mathscr{H}_S$ симметричных функций, для которых

$$P_\pi \Psi(\xi_1,\ \ldots,\ \xi_n) = \Psi(\xi_1,\ \ldots,\ \xi_n)$$

и подпространство $\mathscr{H}_A$ антисимметричных функций

$$P_{\pi}\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n) = (-1)^{[\pi]}\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n),$$

где через $[\pi]$ обозначена четность перестановки π. Очевидно, что $\mathscr{H}_A \perp \mathscr{H}_S$.

В случае двух частиц $\mathscr{H} = \mathscr{H}_A \oplus \mathscr{H}_S$. Действительно, любая функция $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ может быть записана в виде

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{\Psi(\xi_1, \xi_2) + \Psi(\xi_2, \xi_1)}{2} + \frac{\Psi(\xi_1, \xi_2) - \Psi(\xi_2, \xi_1)}{2} =$$

$$= \Psi_S(\xi_1, \xi_2) + \Psi_A(\xi_1, \xi_2), \qquad \text{где } \Psi_S \in \mathscr{H}_S, \text{ а } \Psi_A \in \mathscr{H}_A.$$

В случае большего числа частиц имеются и более сложные, чем $\mathscr{H}_S$ и $\mathscr{H}_A$ инвариантные подпространства, однако интереса эти подпространства не представляют. Принцип тождественности утверждает, что пространством состояний системы из n одинаковых частиц является либо пространство $\mathscr{H}_A$, либо пространство $\mathscr{H}_S$. Выбор одного из этих пространств в качестве пространства состояний зависит только от рода частиц.

Говорят, что частицы, состояния которых описываются симметричными функциями, подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна, а частицы, описываемые антисимметричными функциями, подчиняются статистике Ферми — Дирака. Первые называются бозонами, а вторые — фермионами.

Оказывается, что статистика, которой подчиняются частицы, определяется их спином. Частицы с целым спином (в том числе и без спина) являются бозонами, а частицы с полуцелым спином — фермионами. В нерелятивистской квантовой механике нет объяснения связи спина и статистики, отчасти эта связь объясняется в релятивистской квантовой механике. Фермионами являются электроны, протоны, нейтроны, спин которых равен 1/2, бозонами являются фотоны, спин которых равен единице, и мезоны, у которых спин равен нулю. Статистика составных тождественных частиц (например, атомных ядер) определяется четностью входящих в их состав фермионов, так как перестановка одинаковых сложных частиц эквивалентна перестановке нескольких пар элементарных частиц. Так, дейтроны, состоящие из нейтрона и протона, являются бозонами. Заметим, что спин дейтрона целый *, так как спины протона и нейтрона равны 1/2.

Выпишем оператор Шредингера для системы попарно взаимодействующих частиц, находящейся во внешнем поле

$$H = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2m}\Delta_i + \sum_{i=1}^{n} V(\mathbf{x}^{(i)}) + \sum_{i<k}^{n} U(\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(k)}).$$

Первый член есть оператор кинетической энергии системы частиц, второй — описывает взаимодействие частиц с внешним

* Из экспериментов известно, что спин дейтрона равен единице.

полем, а третий — взаимодействие частиц между собой. Обратим внимание на то, что массы всех частиц одинаковы, а потенциалы взаимодействия $V(\mathbf{x})$ и $U(\mathbf{x})$ не зависят от номеров частиц. Вследствие этого оператор Шредингера H коммутирует со всеми операторами P_π, $[H, P_\pi] = 0$.

§ 49. Симметрия координатных волновых функций системы двух электронов. Атом гелия

Электроны являются фермионами, поэтому волновая функция для системы двух электронов должна быть антисимметричной

$$\Psi(\xi_2, \xi_1) = -\Psi(\xi_1, \xi_2).$$

Разложим функцию $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ по введенным в § 47 базисным функциям W_1, W_2, W_3, W_4:

$$\Psi\left(\mathbf{x}^{(1)} s_3^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)} s_3^{(2)}\right) = \sum_{i=1}^{4} \Psi_i(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)})\, W_i\left(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}\right). \tag{1}$$

Первые три слагаемых в этой сумме соответствуют состояниям с полным спином единица, а четвертое описывает состояние с полным спином нуль. Введенные соотношением (1) функции $\Psi_i(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)})$, $i = 1, 2, 3, 4$ называются координатными волновыми функциями в отличие от $\Psi(\xi_1, \xi_2)$, которую называют полной волновой функцией. В § 47 мы видели, что $W_i\left(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}\right)$ при $i = 1, 2, 3$ являются симметричными относительно перестановки спиновых переменных, $W_4\left(s_3^{(1)}, s_3^{(2)}\right)$ — антисимметричная функция. Тогда из антисимметричности полной функции следует, что

$$\Psi_i(\mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{x}^{(1)}) = -\Psi_i(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}), \quad i = 1, 2, 3,$$
$$\Psi_4(\mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{x}^{(1)}) = \Psi_4(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}),$$

т. е. координатные волновые функции для состояний со спином единица являются антисимметричными, а для состояний со спином нуль — симметричными.

Применим этот результат к атому гелия. Оператор Шредингера для атома гелия в пренебрежении спиновыми взаимодействиями имеет вид *

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}.$$

---

* В точной постановке задачи оператор Шредингера содержит члены, зависящие от спина, однако вывод выражения для спинового взаимодействия возможен только в релятивистской квантовой механике. Кроме того, для атома гелия эти члены играют роль малых поправок и всегда учитываются по теории возмущений.

Если $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ является решением уравнения

$$H\Psi(\xi_1, \xi_2) = E\Psi(\xi_1, \xi_2),$$

то и координатные функции $\Psi_i(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)})$ удовлетворяют уравнению Шредингера с тем же собственным значением E. Поэтому задача сводится к отысканию решений уравнения

$$H\Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}) = E\Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}) \tag{2}$$

в подпространствах симметричных или антисимметричных функций. Ясно, что решений уравнения (2) в каждом из таких подпространств меньше, чем в пространстве $L^2(\mathbf{R}^6)$. Те значения E, для которых уравнение (2) имеет решение в подпространстве антисимметричных функций $\Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)})$, соответствуют состояниям со спином единица, а те значения E, для которых существуют симметричные решения уравнения (2), соответствуют состояниям со спином нуль.

Мы видим, что уровни энергии атома гелия зависят от полного спина даже в пренебрежении спиновыми взаимодействиями в операторе Шредингера. Эта зависимость является следствием принципа тождественности и возникает через симметрию координатных волновых функций.

Можно доказать, что основному состоянию атома гелия соответствует симметричная координатная волновая функция, т. е. спин атома гелия в основном состоянии равен нулю.

Интересно отметить, что переходы с испусканием или поглощением квантов между состояниями с $S = 0$ и $S = 1$ оказываются маловероятными. Поэтому оптический спектр гелия таков, как если бы существовало два сорта гелия с $S = 0$ и $S = 1$. Первый сорт гелия называют парагелием, а второй — ортогелием. Каждому энергетическому уровню парагелия соответствует одно спиновое состояние W_4, а уровню ортогелия — три спиновых состояния W_1, W_2, W_3. Поэтому состояния парагелия называют синглетными, а ортогелия — триплетными. Учет спиновых взаимодействий приводит к расщеплению триплетных уровней энергии на три близких *.

§ 50. Многоэлектронные атомы. Одноэлектронное приближение

Оператор Шредингера многоэлектронного атома или иона с зарядом ядра Z имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i - \sum_{i=1}^{n}\frac{Z}{r_i} + \sum_{i<j}^{n}\frac{1}{r_{ij}}.$$

---

* Можно показать, что такое расщепление происходит, если полный орбитальный момент двух электронов $L \neq 0$, поэтому расщепление наблюдается не для всех триплетных уровней энергии.

Этот оператор записан в пренебрежении движением ядра и спиновых взаимодействий. Пренебрежение движением ядра сложных атомов вполне законно, так как поправки, возникающие при его учете, на несколько порядков меньше погрешностей современных методов расчета сложных атомов. Спиновые взаимодействия практически всегда учитываются по теории возмущений, и их роль мы обсудим ниже.

Оператор H соответствует нейтральному атому при $Z = n$, положительному иону при $Z > n$ и отрицательному иону при $Z < n$. Пространством состояний многоэлектронного атома или иона является пространство $\mathscr{H}_A$ антисимметричных функций $\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_2)$. Это пространство, как и в разобранном случае двух частиц, распадается в прямую сумму пространств с определенным полным спином. Соответствующие координатные функции удовлетворяют некоторым условиям симметрии, которые оказываются более сложными, чем в случае двух электронов, и мы их не будем описывать. Задача о нахождении спектра оператора H в $\mathscr{H}_A$ сводится к задачам о спектре оператора H в подпространствах $\mathscr{H}_k$ координатных функций с определенными условиями симметрии.

Спектр оператора H в подпространствах $\mathscr{H}_k$ хорошо изучен при $Z \geqslant n$. В этом случае спектр непрерывен на интервале $-\mu \leqslant E < \infty$ с некоторым, вообще говоря, положительным μ и состоит из бесконечной серии отрицательных собственных значений, накапливающихся к $-\mu$. В различных подпространствах значения μ могут быть различными. При этом дискретный спектр в одном из этих подпространств может налагаться на непрерывный спектр в другом. Таким образом, на части отрицательной полуоси спектр оператора H смешанный, собственные значения лежат на непрерывном спектре.

Случай $Z < n$ исследован менее детально. Примеры показывают, что дискретный спектр может быть конечным или отсутствовать. Отсутствие дискретного спектра означает, что устойчивых состояний такого отрицательного иона нет. Из экспериментов, например, известно, что существует одно устойчивое состояние отрицательного иона водорода ($Z = 1$, $n = 2$). Строго доказана только конечность дискретного спектра для такой системы.

Задача о построении собственных функций оператора H для многоэлектронного атома является чрезвычайно сложной, так как уравнение $H\Psi = E\Psi$ не допускает разделения переменных. Эта сложность связана с последним членом в операторе H, учитывающим взаимодействие между электронами. Попытка учесть этот член по теории возмущений приводит к плохим результатам, так как взаимодействие между электронами имеет тот же порядок, что и взаимодействие электронов с ядром.

Один из простых способов приближенного учета взаимодействия между электронами состоит в замене последнего члена

в H суммой $\sum_{i=1}^{n} V(r_i)$, где потенциал $V(r)$ может быть истолкован как потенциал взаимодействия электрона с распределенным по объему атома зарядом остальных электронов. Потенциал $V(r)$ называют самосогласованным, так как он зависит от состояния атома, которое в свою очередь зависит от $V(r)$.

Замена последнего члена в H на $\sum_{i=1}^{n} V(r_i)$ приводит к приближенному оператору Шредингера

$$H' = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \Delta_i + \sum_{i=1}^{n} U(r_i),$$

где $U(r) = -Z/r + V(r)$. О потенциале $U(r)$ априори мы можем сказать только, что

$$U(r) \cong -\frac{Z}{r}, \quad r \to 0, \quad U(r) \cong -\frac{1}{r}, \quad r \to \infty.$$

Мы увидим в дальнейшем, что существуют методы, позволяющие находить этот потенциал, однако для понимания структуры сложных атомов достаточно предположения, что H может быть довольно точно аппроксимирован оператором H', а разность $H' - H = W$ может быть учтена по методу возмущений.

Приближенное уравнение Шредингера

$$H'\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n) = E\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n) \qquad (1)$$

допускает разделение переменных. Будем искать решения этого уравнения в виде

$$\Psi(\xi_1, \ldots, \xi_n) = \psi_1(\xi_1) \ldots \psi_n(\xi_n). \qquad (2)$$

Подстановка (2) в (1) показывает, что если функции $\psi_1(\xi_1), \ldots$ $\ldots, \psi_n(\xi_n)$ являются собственными функциями оператора Шредингера для частицы в центральном поле $U(r)$

$$-\frac{1}{2}\Delta\psi_k(\xi) + U(r)\psi_k(\xi) = E_k\psi_k(\xi), \qquad (3)$$

то функция (2) является собственной функцией оператора H', соответствующей собственному значению $E = E_1 + \ldots + E_n$. Функция (2), однако, не удовлетворяет принципу тождественности. Полная волновая функция должна быть антисимметричной. Заметим, что если Ψ удовлетворяет уравнению (1), то и $P_\pi\Psi$ является собственной функцией H' с тем же собственным значением E. Поэтому в качестве собственной функции, удовлетворяющей принципу тождественности, следует взять

антисимметричную комбинацию функций $P_\pi\Psi$, т. е.

$$\Psi_A(\xi_1, \ldots, \xi_n) = C \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \ldots & \psi_1(\xi_n) \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \psi_n(\xi_1) & \ldots & \psi_n(\xi_n) \end{vmatrix}, \qquad (4)$$

где C — постоянная, которая находится из условия нормировки. Функция (4) является антисимметричной, так как перестановка координат эквивалентна перестановке столбцов определителя.

Функции (2) и (4) могут быть истолкованы следующим образом. Функция (2) описывает состояние системы электронов, в которой первый электрон находится в одноэлектронном состоянии ψ_1, второй электрон — в состоянии ψ_2 и т. д. Функция (4) соответствует состоянию системы, в котором n электронов заполняют n одноэлектронных состояний и не имеет смысла говорить о том, какой электрон в каком состоянии находится.

Заметим, что не для любого решения (2) возможно построение функции (4). Определитель (4) отличен от нуля только при условии, что среди функций $\psi_1, \ldots, \psi_n$ нет одинаковых. Этот результат называется принципом Паули и его можно сформулировать следующим образом.

В одном и том же одноэлектронном состоянии не может находиться более одного электрона.

Представление о состоянии отдельного электрона связано с одноэлектронным приближением. Для произвольного состояния системы волновая функция не представима в виде (2) или (4), и понятие о состоянии одного электрона теряет смысл. Существует формулировка принципа Паули, не связанная с одноэлектронным приближением, однако в общей формулировке принцип Паули теряет свою наглядность, и мы не будем приводить такую формулировку. Отметим, что принцип Паули является следствием антисимметричности волновой функции и справедлив только для фермионов.

Рассмотрим вопрос о классификации энергетических уровней многоэлектронного атома. Точный оператор Шредингера для атома можно записать в виде

$$H = H' + W_C + W_S,$$

где

$$W_C = \sum_{i<j}^{n} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^{n} V(r_i),$$

а W_S описывает спиновые взаимодействия. Явный вид оператора W_S нам не понадобится. Расчеты атомов показывают, что поправки, вносимые операторами W_C и W_S, довольно точно могут быть найдены по теории возмущений, причем для атомов первой половины таблицы Менделеева главный вклад дают поправки от W_C. Поэтому возникает возможность повторного

применения теории возмущений, т. е. сначала в качестве невозмущенного оператора можно взять H' и оператор W_C рассматривать как возмущение, а затем W_S рассматривать как возмущение оператора $H' + W_C$.

Оператор H' весьма богат симметриями, поэтому собственные значения этого оператора обычно имеют довольно большую кратность. Посмотрим, за счет чего она возникает. Собственные функции уравнения (3) без учета спина классифицируются тремя квантовыми числами n, l, m. Спиновые состояния можно учесть, введя спиновое квантовое число m_s, принимающее два значения $\pm 1/2$ по формуле

$$U_{m_s}(s_3) = \begin{cases} U_+(s_3), & m_s = \frac{1}{2}, \\ U_-(s_3), & m_s = -\frac{1}{2}. \end{cases}$$

Тогда собственные функции уравнения (3) могут быть записаны в виде

$$\psi_{nlmm_s}(\mathbf{x}, s_3) = \psi_{nlm}(\mathbf{x}) U_{m_s}(s_3). \qquad (5)$$

Собственные значения уравнения (3) зависят только от квантовых чисел n, l. Поэтому собственное значение E оператора H' зависит от набора квантовых чисел n и l для всех электронов. Этот набор квантовых чисел n и l называется конфигурацией атома. Для записи конфигурации принято значениям $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$ сопоставлять буквы s, p, d, f, ... Тогда одноэлектронное состояние (5) с $n = 1$, $l = 0$ называют $1s$-состоянием, состояние с $n = 2$, $l = 1$ $2p$-состоянием и т. д. Для атома лития, например, возможны конфигурации $(1s)^2 2s$, $(1s)^2 2p$, $1s2s2p$, ... В первой из этих конфигураций два электрона находятся в $1s$-состоянии и один в $2s$-состоянии.

Совокупность состояний с одинаковыми квантовыми числами n и l называется оболочкой. Состояния электронов одной оболочки различаются квантовыми числами m и m_s. Для оболочки с квантовым числом l число таких состояний равно $2(2l + 1)$, так как m принимает значения $-l, -l + 1, \ldots, l$, а $m_s = \pm 1/2$. Оболочка, в которой заняты все $2(2l + 1)$-состояний, называется заполненной. Заполненной оболочке соответствует вполне определенный набор функций (5). Для незаполненной оболочки возможен различный выбор функций (5), отличающихся числами m и m_s. Поэтому кратными оказываются те собственные значения оператора H', которым соответствуют конфигурации, содержащие незаполненные оболочки. Например, кратность собственного значения, соответствующего конфигурации $(1s)^2(2p)^2$, равна $C_6^2 = 15$, так как имеется шесть $2p$-состояний, которые заняты двумя электронами.

Поправки от возмущения W_C могут быть найдены при диагонализации матрицы этого возмущения, построенной при

помощи всевозможных функций (4), соответствующих данной конфигурации. Однако обычно в такой диагонализации нет необходимости. В теории атомных спектров доказывается, что если заменить собственные функции (4) для данной конфигурации их линейными комбинациями, которые являются собственными функциями операторов квадрата полного орбитального момента импульса L^2, квадрата полного спинового момента S^2 и операторов L_3, S_3

$$L^2\Psi = L(L+1)\Psi,$$
$$S^2\Psi = S(S+1)\Psi,$$
$$L_3\Psi = M_L\Psi,$$
$$S_3\Psi = M_S\Psi,$$

то матрица возмущения оказывается диагональной относительно квантовых чисел L, S, M_L, M_S, причем ее элементы не зависят от чисел M_L и M_S. Таким образом, вырожденный уровень энергии, соответствующий конфигурации K, расщепляется на несколько уровней, соответствующих возможным значениям L и S. Совокупность $(2M_L+1)(2M_S+1)$-состояний с заданными конфигурацией и числами L и S называется термом *.

Учет возмущения W_S может быть сделан для каждого терма по отдельности. При этом оказывается, что уровень энергии, соответствующий терму, расщепляется на несколько близких уровней. Совокупность этих уровней называется мультиплетом. Можно показать, что состояния, соответствующие различным уровням мультиплета, различаются квантовым числом J. Это число характеризует собственные значения квадрата полного момента импульса, являющегося суммой полного орбитального и полного спинового моментов.

Наконец, каждому уровню мультиплета соответствует несколько состояний, различающихся проекцией полного момента M_J. Это вырождение может быть снято, если поместить атом в магнитное поле.

Мы видим, что классификация энергетических уровней сложного атома (конфигурация, L, S, J) соответствует иерархии слагаемых оператора Шредингера H', W_C, W_S.

§ 51. Уравнения самосогласованного поля

Описанный в предыдущем параграфе подход к изучению спектра сложных атомов хотя и позволяет понять классификацию энергетических уровней, но не является удобным для практических расчетов. Наиболее эффективным для этой цели яв-

* Если в незаполненных оболочках более двух электронов, то может появиться несколько термов с одинаковыми конфигурацией, L и S. В этом случае матрица возмущения W_C является квазидиагональной и для вычисления поправок первого приближения необходима ее диагонализация.

ляется метод самосогласованного поля (метод Хартри — Фока), основанный на применении вариационного принципа. В этом параграфе мы расскажем об основных идеях этого метода.

В основе метода Хартри — Фока также лежит одноэлектронное приближение. Волновая функция сложного атома аппроксимируется либо произведением одноэлектронных функций $\Psi = \psi_1(\xi_1) \ldots \psi_n(\xi_n)$ (принцип тождественности при этом не учитывается), либо определителем

$$\Psi = C \begin{vmatrix} \psi_1(\xi_1) & \ldots & \psi_1(\xi_n) \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \psi_n(\xi_1) & \ldots & \psi_n(\xi_n) \end{vmatrix},$$

либо линейной комбинацией таких определителей. Из условия стационарности функционала $(H\Psi, \Psi)$ при дополнительном условии $(\Psi, \Psi) = 1$ получается система интегродифференциальных уравнений для одноэлектронных функций $\psi_1(\mathbf{x}), \ldots, \psi_n(\mathbf{x})$.

Проиллюстрируем такой подход на примере атома гелия, оператор Шредингера для которого имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = H_1 + H_2 + \frac{1}{r_{12}}, \qquad (1)$$

где
$$H_i = -\frac{1}{2}\Delta_i - \frac{2}{r_i}, \quad i = 1, 2.$$

Будем искать приближенную волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}) = \psi_1(\mathbf{x}^{(1)})\,\psi_2(\mathbf{x}^{(2)}).$$

Заметим, что условие

$$(\Psi, \Psi) = \int_{R^6} |\psi_1(\mathbf{x}^{(1)})\,\psi_2(\mathbf{x}^{(2)})|^2\, d\mathbf{x}^{(1)}\, d\mathbf{x}^{(2)} = 1$$

может быть заменено двумя условиями

$$\int_{R^3} |\psi_1(\mathbf{x})|^2\, d\mathbf{x} = 1, \quad \int_{R^3} |\psi_2(\mathbf{x})|^2\, d\mathbf{x} = 1, \qquad (2)$$

которые не сужают класса варьируемых функций. Функционал $(H\Psi, \Psi)$ имеет вид

$$(H\Psi, \Psi) = \int_{R^3} \bar{\psi}_1 H_1 \psi_1\, d\mathbf{x}^{(1)} \int_{R^3} |\psi_2|^2\, d\mathbf{x}^{(2)} +$$
$$+ \int_{R^3} \bar{\psi}_2 H_2 \psi_2\, d\mathbf{x}^{(2)} \int_{R^3} |\psi_1|^2\, d\mathbf{x}^{(1)} + \int_{R_6} \frac{|\psi_1|^2 |\psi_2|^2}{r_{12}}\, d\mathbf{x}^{(1)}\, d\mathbf{x}^{(2)}. \qquad (3)$$

Варьируя этот функционал по функциям ψ_1 и ψ_2 при условиях (2) и используя метод неопределенных множителей Лагранжа, имеем

$$H_1\psi_1 + \left(\int\limits_{R^3} \frac{|\psi_2|^2}{r_{12}}\, d\mathbf{x}^{(2)}\right)\psi_1 = \varepsilon_1\psi_1,$$
$$H_2\psi_2 + \left(\int\limits_{R^3} \frac{|\psi_1|^2}{r_{12}}\, d\mathbf{x}^{(1)}\right)\psi_2 = \varepsilon_2\psi_2. \qquad (4)$$

Мы получили систему нелинейных интегродифференциальных уравнений для функций $\psi_1(\mathbf{x})$ и $\psi_2(\mathbf{x})$. Уравнения (4) допускают очень простое физическое толкование. Например, первое уравнение можно рассматривать как уравнение Шредингера для первого электрона, который находится в поле ядра и в поле, создаваемом зарядом второго электрона. Этот заряд как бы размазан по объему атома с плотностью $|\psi_2(\mathbf{x}^{(2)})|^2$ (напомним, что заряд электрона $e = 1$), и интеграл во втором слагаемом (4) есть потенциал такого объемного распределения заряда. Отметим, что этот потенциал неизвестен и находится при решении системы (4), кроме того, в отличие от модели предыдущего параграфа каждый электрон оказывается в своем потенциальном поле, зависящем от состояния другого электрона.

Уравнения (4) были впервые предложены Хартри, который написал их исходя из приведенных выше физических соображений. Фок установил связь этих уравнений с вариационным принципом, и им же было предложено уточнение метода Хартри, учитывающее принцип тождественности. Уравнения Фока оказываются несколько сложнее, часть из входящих в них «потенциалов» (обменные потенциалы) уже не допускает столь простого физического толкования. Эти потенциалы возникают вследствие свойств симметрии волновой функции.

При практических расчетах по методу Фока обычно с самого начала ищут одноэлектронные функции $\psi_k(\xi)$ в виде функций центрального поля $\psi_{nlmm_s}(\xi) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\mathbf{n})\, U_{m_s}(s_3)$.

Основные этапы расчета состоят в следующем. Сначала находят выражение для волновой функции определенного терма в виде линейной комбинации определителей. Далее составляется выражение для функционала $(H\Psi, \Psi)$. Наконец, этот функционал варьируется по радиальным функциям $R_{nl}(r)$ (техника всех этих операций детально разработана). В результате получается система интегродифференциальных уравнений для функций одной переменной. Число неизвестных функций этой системы равно числу оболочек изучаемой конфигурации атома.

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показывает, что точность вычисления энергетических уровней легких атомов по методу самосогласованного поля составляет около 5%.

§ 52. Периодическая система элементов Д. И. Менделеева

Периодический закон был открыт Менделеевым в 1869 г. и является одним из важнейших законов природы. В основу своей системы Менделеев положил тот факт, что если расположить элементы в порядке возрастания атомных весов, то элементы с близкими химическими и физическими свойствами периодически повторяются.

К моменту открытия периодического закона было известно лишь 63 элемента, атомные веса многих элементов были определены неправильно и Менделееву пришлось их изменить*. Ряд клеток таблицы Менделеев оставил незаполненными, считая, что им соответствуют еще неоткрытые элементы. Свойства трех таких элементов были предсказаны Менделеевым с удивительной точностью. Наконец, в нескольких случаях Менделеев отказался от строгого расположения элементов в порядке возрастания атомных весов и ввел понятие об атомном номере Z.

Открытый Менделеевым закон первоначально был чисто эмпирическим. Никакого объяснения периодичности свойств элементов во времена Менделеева не было, да и не могло быть, ведь электрон был открыт Томсоном в 1897 г., а атомное ядро — Резерфордом в 1910 г.

Объяснение периодического закона во всем объеме является сложной задачей квантовой химии, однако понять природу периодичности свойств элементов можно уже в рамках упрощенной модели атома, описанной в § 50. Напомним, что эффективный потенциал для электрона в атоме $V(r)$ не является кулоновским и собственные значения одноэлектронного оператора Шредингера зависят от квантовых чисел n и l. Расчеты показывают, что для типичного эффективного потенциала атома собственные значения E_{nl} возрастают в следующем порядке: $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $4s$, $3d$, $4p$, $5s$, $4d$, $5p$, ... Именно в таком порядке происходит заполнение электронных оболочек атома (в этом параграфе мы рассматриваем только основные состояния атомов). Этот порядок, однако, не является строгим, так как у каждого элемента свой эффективный потенциал и для некоторых элементов возможны небольшие отклонения в порядке заполнения оболочек.

Чтобы понять принцип, по которому происходит деление элементов по периодам, укажем на следующую особенность d- и f-электронов, отличающую их от s- и p-электронов. Расчеты показывают, что плотность функции распределения координат $|\psi(x)|^2$ для d- и f-электронов сосредоточена в области меньших размеров, чем для s- и p-электронов с близкими энергиями.

---

* Например, атомный вес цезия считался равным 92, Менделеев приписал ему значение 138 (современное значение 140).

Это значит, что d- и f-электроны в среднем находятся значительно ближе к ядру, чем s- и p-электроны. Поэтому элементы, в которых происходит заполнение d- и особенно f-оболочек обладают сходными химическими свойствами. (Химические свойства в основном зависят от состояний периферических электронов атома. Объяснение этого утверждения дает квантовая теория валентности.)

Первым элементом каждого периода таблицы Менделеева является элемент, у которого начинает заполняться s-оболочка. Все эти элементы, за исключением водорода, — щелочные металлы. Последним элементом каждого периода является элемент, у которого завершается заполнение p-оболочки (исключение представляет первый период, элементы которого, водород и гелий, не содержат p-электронов). Последние элементы периодов являются благородными газами. Конфигурации атомов благородных газов состоят из заполненных оболочек. Можно показать, что соответствующие состояния преобразуются при вращениях по неприводимому представлению D_0, т. е. являются сферически-симметричными. Таким же свойством обладают положительные однозарядные ионы щелочных металлов, конфигурация которых совпадает с конфигурациями предшествующего благородного газа. Именно поэтому оптические свойства щелочных металлов хорошо описывает модель валентного электрона в центральном поле.

Последовательность электронных оболочек разбивается по периодам следующим образом:

I	$1s$,	2 элемента
II	$2s$, $2p$	8 элементов
III	$3s$, $3p$,	8 —»—
IV	$4s$, $3d$, $4p$,	18 —»—
V	$5s$, $4d$, $5p$,	18 —»—
VI	$6s$, $4f$, $5d$, $6p$,	32 элемента
VII	$7s$, $6d$, $5f$, . . .	

Номера периодов обозначены римскими цифрами. Справа указано число элементов периода. Это число легко находится, если вспомнить, что число одноэлектронных состояний с квантовыми числами n и l равно $2(2l+1)$. Например, число элементов шестого периода равно $2+14+10+6=32$. Номер периода совпадает с главным квантовым числом заполняющихся s- и p-оболочек.

Элементы, содержащие заполненные d- и f-оболочки (или не содержащие таких оболочек), называются элементами главных групп. Элементы, в которых происходит заполнение d- и f-оболочек, называются элементами промежуточных групп.

Элементы промежуточных групп имеют близкие химические свойства, в особенности это справедливо для групп, в которых происходит заполнение f-оболочек (оболочка $4f$ заполняется в группе редкоземельных элементов).

Отметим, что при заполнении d- и f-оболочек иногда наблюдаются отклонения от указанного выше порядка. Например, конфигурациями основных состояний атомов V, Cr, Mn являются $(3d)^3(4s)^2$, $(3d)^5 4s$, $(3d)^5(4s)^2$ соответственно (мы не выписали конфигурацию заполненных оболочек, общую для всех этих атомов $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6$). Оказывается, что

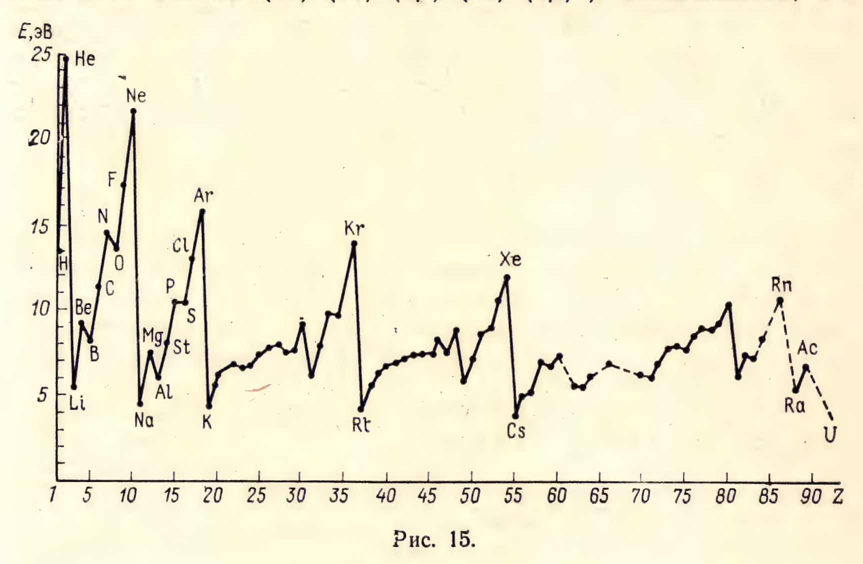


Рис. 15.

конфигурация $(3d)^5 4s$ для атома Cr энергетически более выгодна, чем $(3d)^4(4s)^2$, которую мы приписали бы хрому, руководствуясь нашей моделью. Ясно, что это отклонение не может быть объяснено в рамках модели, в которой эффективный потенциал одинаков для всех электронов.

В заключение проследим за изменением энергии связи* электрона в атомах. Этот параметр тесно связан с химическими свойствами элементов и характеризует способность атомов «отдавать» электрон, вступая в химические соединения.

Вспомним, что эффективный потенциал атома $U(r) \cong -1/r$ при $r \to \infty$ и $U(r) \cong -Z/r$ при $r \to 0$. Поэтому естественно ожидать (и это подтверждается расчетами), что с увеличением Z эффективный потенциал становится более сильным, т. е.

* Энергией связи называется абсолютная величина разности между энергиями основных состояний атома и соответствующего положительного однозарядного иона, иначе говоря, энергия связи равна минимальной работе, которую нужно затратить, чтобы вырвать электрон из атома.

соответствующие одноэлектронные уровни энергии для последующего атома лежат глубже, чем для предыдущего. Поэтому энергия связи должна возрастать в ряду элементов, соответствующем заполнению некоторой оболочки. Однако при переходе к заполнению следующей оболочки энергия связи может падать. Особенно сильное падение энергии связи наблюдается в начале каждого периода, когда начинает заполняться новая s-оболочка. На рис. 15 нанесены экспериментальные значения энергии связи для различных элементов. По горизонтальной оси отложен атомный номер элемента Z. Из рисунка видно, что для каждого периода минимальное значение энергии связи имеют щелочные металлы, а максимальное — атомы благородных газов. Химическая инертность благородных газов в значительной степени объясняется большой величиной энергии связи.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ИБ № 956

Фаддеев Людвиг Дмитриевич, Якубовский Олег Александрович

Лекции по квантовой механике
для студентов-математиков

Редактор *Г. А. Григенч*
Техн. редактор *Л. А. Топорина* Корректоры *К. Я. Евнина*, *Т. Г. Павлова*

Сдано в набор 10.08.79. Подписано к печати 19.01.80. Формат 60×90 1/16. Бум. тип. № 2. Уч. изд. л. 11,29. Печ. л. 12,5. Тираж 9774 экз. Заказ 330. Цена 35 коп.

Издательство ЛГУ имени А. А. Жданова. 199164, Ленинград, Университетская наб., 7/9.

Ордена Трудового Красного Знамени Ленинградская типография № 2 имени Евгении Соколовой «Союзполиграфпрома» при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли. 198052, Ленинград, Л-52, Измайловский проспект, 29

35 коп.

ИЗДАТЕЛЬСТВО ЛЕНИНГРАДСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ